

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

На правах рукописи
УДК 519.642.2, 519.642.6

Матвеев Сергей Александрович

**Быстрые методы численного решения уравнений типа
Смолуховского**

Специальность 05.13.18 – “Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ”

Диссертация

на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:
академик РАН,
доктор физико-математических наук
Тыртышников Е.Е.

Москва, 2017

Оглавление

Введение	4
1 Математические модели физических процессов, записанные в классе уравнений типа Смолуховского	12
1.1 Общие черты рассматриваемых физических систем	12
1.2 Базовая модель коагуляции Смолуховского	13
1.3 Математические модели, записанные с помощью уравнений типа Смолуховского	17
1.3.1 Модель необратимой коагуляции с источником мономеров	17
1.3.2 Уравнения коагуляции-дробления	18
1.3.3 Локальная модель агрегации и фрагментации в профиле почвы	19
1.3.4 Многокомпонентная коагуляция	22
2 Численные методы решения уравнений типа Смолуховского	24
2.1 Общие сведения о быстрых алгоритмах линейной алгебры и методах малоранговой аппроксимации функций многих переменных	25
2.1.1 Скелетное разложение матрицы	25
2.1.2 Тензорные разложения	27
2.2 Численные методы решения уравнений однокомпонентной коагуляции - дробления	32
2.2.1 Методы Монте-Карло в применении к уравнению Смолуховского	32
2.2.2 Разностные методы численного решения уравнения Смолуховского	36
2.2.3 Итерационный метод решения уравнений агрегации и фрагментации в стационарной форме	51

2.3	Применение ТТ-разложений для ускорения конечно-разностной схемы решения уравнения многокомпонентной коагуляции	56
2.3.1	Метод с использованием вложенного вызова ТТ-крестового метода	56
2.3.2	Быстрый метод решения уравнения многокомпонентной коагуляции	60
3	Теоретические оценки рангов некоторых классов ядер коагуляции и аналитических решений	70
3.1	Оценки рангов некоторых классов ядер коагуляции	70
3.2	Оценки рангов одного класса аналитических решений задачи Коши для уравнения Смолуховского	75
4	Результаты численных экспериментов	79
4.1	Описание программного комплекса, применяемого для решения поставленных задач	79
4.2	Результаты численных экспериментов по решению уравнений однокомпонентных моделей	86
4.2.1	Исследование модели агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна	86
4.2.2	Масштабируемость параллельной реализации быстрого метода решения уравнений агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна	87
4.2.3	Исследование модели необратимой коагуляции с источником мономеров	90
4.2.4	Исследование локальной модели почвенной агрегации	92
4.2.5	Результаты численных экспериментов для непрерывного уравнения Смолуховского	93
4.3	Результаты численных экспериментов по решению многокомпонентных моделей	97
	Заключение	108
	Литература	110

Введение

Данная работа посвящена разработке алгоритмов и комплекса программ для численного решения систем кинетических уравнений процессов агрегации и фрагментации. Первая математическая модель коагуляции была предложена Марианом Смолуховским в 1916 году [1] в виде формально бесконечной системы кинетических уравнений, каждое из которых описывало изменение во времени концентрации частиц некоторого размера k на единицу объёма среды. Впоследствии, модель Смолуховского была обобщена в 1928 году до вида интегро-дифференциального уравнения Гансом Мюллером [2]. Эти математические модели описывают процесс слияния огромного числа хаотически движущихся частиц сложной пространственно-однородной системы, возникающий вследствие их неупругих соударений. В качестве искомым величин в данных моделях участвуют средние концентрации частиц конкретных размеров, и, формально, эти модели описывают эволюцию концентраций частиц сколь угодно больших размеров на единицу объёма среды.

Отталкиваясь от базовых моделей Смолуховского и Мюллера, различные научные группы значительно расширили круг процессов, описываемых математическими моделями этого типа: от процесса слияния частиц при соударениях до процессов их дробления на осколки [3], как вследствие столкновений друг с другом, так и из-за неустойчивости крупных частиц [4], выпадения частиц из рассматриваемой физической системы или их вброса в систему [5] и др [6–9].

Математические модели, основывающиеся на использовании кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского применяются для описания самых разнообразных явлений и технологических процессов: математические модели процессов коагуляции-дробления используются при изучении

динамики аэрозолей в атмосфере [9], для описания процессов агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна [3], роста полимеров [10], кинетики белков-прионов [7, 8, 11] и др [5, 12–15].

Основной целью диссертационной работы является построение быстрых детерминистических алгоритмов численного решения уравнений типа уравнений Смолуховского на основе применения малоранговой аппроксимации многомерных матриц, а также быстрых алгоритмов линейной алгебры, теоретическое исследование построенных алгоритмов, сравнение их эффективности с известными методологиями решения уравнений рассматриваемых математических моделей процессов агрегации и фрагментации, а также реализация предложенных методов в виде комплекса программ.

В качестве основной альтернативы разрабатываемым методикам в этой работе будут рассматриваться популярные стохастические методы (методы Монте Карло) [16–21]. Достоинствами этих методов являются простота реализации и физическая наглядность этапов алгоритмов, а также хорошее описание **интегральных** характеристик решения, недостатком – сложности при обосновании сходимости и низкое качество приближения полных распределений частиц по размерам из гистограмм.

Научная новизна. Предложены новые быстрые алгоритмы численного решения уравнений математических моделей процессов агрегации и фрагментации типа уравнений Смолуховского, позволяющие в тысячи раз ускорить исходную схему без потери точности расчётов. В работе приведены оценки арифметической сложности сформулированных алгоритмов, а для ряда математических моделей процессов агрегации и фрагментации сформулированы и доказаны теоремы, обосновывающие эффективность предложенной методологии. Предложенные алгоритмы реализованы программно в виде комплекса программ, точность новых методов протестирована на ряде задач с известными аналитическими решениями, а также в сравнении с классической разностной методологией и с методом Монте Карло. Приводимые в работе алгоритмы позволяют расширить круг рассматриваемых задач математического моделирования, а также повысить точность исследования уже известных свойств решений математических моделей процессов агрегации и фрагментации.

Теоретическая ценность работы заключается в построении быстрых методов численного решения систем кинетических уравнений типа уравне-

ния Смолуховского, оценках рангов разложений с разделёнными переменными для ряда ядер коагуляции, а также известных аналитических решений математических моделей, сформулированных на основе уравнения Смолуховского. В случае дискретных однокомпонентных моделей агрегации и фрагментации построены консервативные методы, позволяющие сохранять физически важную инвариантную характеристику решения (т.н. *полная масса* на единицу объёма среды). Предложены быстрые методы вычисления операции нелинейной многомерной свёртки функций в интегральном виде со вторым порядком точности по шагу сетки. Для всех предложенных алгоритмов в работе даны оценки их алгоритмической сложности.

Практическая ценность работы заключается в программной реализации предложенных алгоритмов на языках *C++* и *Python* с использованием технологий параллельного программирования *MPI* и *OpenMP*. Разработанный комплекс программ позволяет проводить расчёты решения задачи Коши для рассматриваемых уравнений моделей агрегации и фрагментации, а также численно решать уравнения тех же моделей в стационарной форме.

На защиту выносятся следующие результаты и положения. Основной результат – разработаны алгоритмы и комплекс программ для решения уравнений математических моделей процессов агрегации и фрагментации, основанных на уравнениях Смолуховского, в частности

- Предложены и обоснованы быстрые алгоритмы численного решения уравнений типа Смолуховского. В частности, предложены быстрые вычислительные методы решения уравнений математических моделей процессов необратимой коагуляции, агрегации и фрагментации частиц в кольцах Сатурна, необратимой коагуляции с источником и стоком частиц, процессов агрегации и фрагментации частиц в профиле почв.
- Новые алгоритмы реализованы в виде программного комплекса, проведён ряд численных экспериментов, иллюстрирующих эффективность и точность предложенных алгоритмов. Для рассматриваемых математических моделей качественно, расширен класс решаемых задач, с применением предложенных алгоритмов получен ряд новых результатов математического моделирования.

Апробация работы Основные результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались

- на научных семинарах института вычислительной математики РАН
- семинаре им. С. М. Белоцерковского ЦАГИ
- семинаре “Методы Монте-Карло в вычислительной математике и математической физике” ИВМиМГ СО РАН
- семинарах кафедры вычислительных технологий и моделирования МГУ им. М. В. Ломоносова
- семинарах аналитической теории дифференциальных уравнений математического института академии наук им. Стеклова

и на следующих конференциях:

1. “Тихоновские чтения 2013” (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, 2013)
2. 56 научная конференция МФТИ (Москва – Долгопрудный – Жуковский, 2013)
3. “Ломоносовские чтения 2014” (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, 2014)
4. “8th international congress on industrial and applied mathematics ICIAM 2015” (Пекин, Китай, 2015)
5. “4th International Conference on Matrix Methods in Mathematics and Applications (МММА-2015)” (Сколково – Москва, 2015)
6. “Physics Informed Machine Learning” (Санта Фе, Нью Мексико, США, 2016)
7. “Ломоносовские чтения 2016” (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, 2016)
8. “20th Conference of the International Linear Algebra Society ILAS 2016” (Лёвен, Бельгия, 2016)

9. 59 научная Конференция МФТИ (Москва – Долгопрудный – Жуковский, 2016)
10. “The Sixth China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications” (Москва, 2017)
11. “30th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics” (Краков, Польша 2017) .

Результаты работы были отмечены Золотой медалью РАН за лучшую студенческую работу по математике 2015 года.

Публикации По теме работы были опубликованы 12 работ, среди которых 5 статей [22–26] (все входят в перечень ВАК), а также 7 печатных работ [27–33] в сборниках тезисов и трудов конференций.

Личный вклад автора. В работе [22] автор сформулировал оригинальные идеи ускорения численной схемы предиктор-корректор, разработал их программную реализацию и провёл обширные вычислительные эксперименты по исследованию возможностей использования предложенных идей на практике. Авторство математических моделей из данной работы принадлежит Н. В. Бриллиантову, постановка задачи численного анализа рассматриваемых уравнений принадлежит Тыртышникову Е.Е. и Смирнову А. П. Работа [24] выполнена автором полностью самостоятельно. В работе [23] автору принадлежат доказательство теоремы о разделении переменных баллистического ядра коагуляции, формулировка эффективной численной схемы решения уравнения коагуляции Смолуховского в непрерывном виде, а также выполнение численных экспериментов, связанных с исследованием производительности разностной методологии. Тыртышникову Е.Е. принадлежит постановка задачи о снижении алгоритмической сложности рассматриваемой разностной схемы, Смирнову А. П. принадлежат программная реализация и вычислительные эксперименты, связанные с исследованием производительности метода Mass Flow Monte Carlo. В работе [25] автор предложил оригинальные идеи выполнения многомерных интегральных преобразований и доказал теоремы о разделении переменных нескольких классов ядер коагуляции и одного класса аналитических решений уравнения Смолуховского. Результаты, связанные с тестированием производительности метода Mass Flow Monte

Carlo в случае многокомпонентного уравнения коагуляции в [25] принадлежат Смирнову А. П. Желтков Д. А. принимал участие в непосредственной программной реализации предложенных в работе алгоритмов, а идейная постановка задачи выполнена всеми авторами работы совместно. В [26] автором проделана большая работа по тестированию производительности программной реализации нового метода решения уравнения многокомпонентной коагуляции для модели с источником и стоком частиц. Постановка решенной в работе задачи выполнена совместно со Смирновым А. П., а Желтков Д. А. и Тыртышников Е.Е. принимали участие в валидации полученных результатов.

Диссертационное исследование законченным и самостоятельным трудом автора.

Структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и списка публикаций автора. Общий объем диссертации 118 страниц, включая 16 рисунков, 18 таблиц и список литературы из 88 наименований.

Содержание работы. В первой главе приводится обзор структуры и общие свойства математических моделей агрегации и дробления вещества, записанных в классе уравнений типа Смолуховского. В главе перечислены известные теоретические факты о разрешимости рассматриваемых моделей, известные классы аналитических решений, а также сформулированы математические модели, для решения которых необходимо построение эффективных численных алгоритмов.

Во второй главе приводятся необходимые сведения из области теории малоранговых матричных и тензорных разложений, а именно понятие ранга матрицы, методы построения малоранговых матричных разложений, дано определение канонического тензорного ранга и канонического тензорного разложения, даны определения разложения в формате тензорного произведения и ТТ-рангов. Далее во второй главе сформулированы численные методы решения однокомпонентных моделей коагуляции и дробления вещества, приведён обзор нескольких методов Монте Карло. В секциях 2.2 и 2.3 предложены новые эффективные методы ускорения шагов разностной схемы предиктор-корректор на основе применения малоранговых матричных аппроксимаций функций ядер коагуляции и быстрых алгоритмов линейной алгебры, пред-

ложена эффективная схема распараллеливания сформулированных быстрых методов, сформулирован простейший быстрый итерационный метод решения однокомпонентных моделей в стационарной форме. В дополнение к предложенному быстрому итерационному алгоритму приведены дополнительные рассуждения о свойствах локальной сходимости метода ускорения Андерсона для квадратичных систем уравнений.

В секции 2.3 второй главы предлагаются два новых численных метода решения многокомпонентного уравнения коагуляции Смолуховского, основанные одновременно использовании малоранговых аппроксимаций ядра коагуляции и решения в формате тензорного произведения для ускорения шагов явной разностной схемы предиктор-корректор. Первый метод основан на рекурсивном применении алгоритма построения малоранговых приближений массивов в ТТ-формате, второй основан на применении и реализации быстрых операций с массивами, представленными в виде ТТ-разложений. В секции предложен новые алгоритмы вычисления операции нижнетреугольной билинейной интегральной свертки функций при помощи квадратуры трапеций со вторым порядком точности, а также быстрый метод вычисления билинейного интегрального оператора типа Фредгольма в параллелепипеде в ТТ-формате со вторым порядком точности.

В третьей главе даны необходимые теоретические оценки рангов разложений в формате тензорного произведения некоторых функций ядер коагуляции, а также оценки рангов одного класса известных аналитических решений задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского. Полученные теоретические оценки доказывают эффективность сформулированной методологии, а также её применимость к широкому классу математических моделей, записанных в классе уравнений Смолуховского.

В четвёртой главе приводится описание программного комплекса с реализацией всех описанных в данной работе алгоритмов и множественные результаты численных экспериментов по тестированию эффективности сформулированной методологии. Проведено сравнение новых методов с исходной разностной методологией и с методами Монте Карло. Предложенная схема распараллеливания быстрого метода решения однокомпонентных моделей протестирована на кластере ИВМ РАН и суперкомпьютере “Ломоносов”. На практике продемонстрированы малые ранги, как функций ядер коагуляции, так

и построенных численных решений. Протестирована точность предложенной методологии – новые методы позволяют в сотни раз повысить точность расчётов и до тысячи раз уменьшить время, необходимое для их проведения.

Заключение содержит основные результаты работы, а также предложения по возможному развитию и использованию предложенной методологии.

Благодарности. Автор выражает благодарность академику РАН Тыртышникову Евгению Евгеньевичу за научное руководство и постоянную поддержку в исследованиях, доценту факультета ВМК МГУ им. М. В. Ломоносова к.ф-м н. Смирнову Александру Павловичу за плодотворное многолетнее научное сотрудничество, а также профессору Лестерского университета д. ф-м н. Бриллиантову Николаю Васильевичу, младшему научному сотруднику института вычислительной математики РАН Желткову Дмитрию Александровичу, старшему научному сотруднику института вычислительной математики РАН к.ф-м н. Замарашкину Николаю Леонидовичу, главному научному сотруднику института вычислительной математики РАН д.ф-м н. Агошкову Валерию Ивановичу, заведующей междисциплинарной лабораторией математического моделирования почвенных систем почвенного института имени Докучаева к. б. н. Васильевой Надежде Аркадьевне за множество полезных советов, замечаний и предложений.

Глава 1

Математические модели физических процессов, записанные в классе уравнений типа Смолуховского

1.1 Общие черты рассматриваемых физических систем

Описание неупруго сталкивающихся взаимодействующих частиц сложной системы – важная задача механики. Именно неупругие столкновения частиц лежат в основе процессов коагуляции (далее также агрегации и слияния) и дробления (далее также фрагментации). В случае пространственной однородности, состояние таких систем определяется балансом между процессами агрегации и фрагментации.

При учёте только парных столкновений частиц процессы коагуляции и дробления могут быть описаны феноменологическими уравнениями, носящими общее название “уравнения Смолуховского” [9, 14, 34]. Эти математические модели представляются обоснованными в случае невысокой плотности рассматриваемых физических систем, когда тройные, четверные и т.д. столкновения частиц сравнительно редки [4, 35]. Тем не менее известны и математические модели такого типа, учитывающие тройные взаимодействия [36]. В данной работе рассматриваются математические модели процессов коагуляции и дробления только с бинарными взаимодействиями частиц.

Процессы агрегации и фрагментации лежат в основе самых разнообраз-

ных физических явлений – от роста полимеров [10], белков прионов [11], возникновения атмосферных осадков, кинетики аэрозолей в атмосфере [9] до образования звёзд и планет [3, 34]. В зависимости от особенностей изучаемых систем можно рассматривать дискретный вариант уравнения Смолуховского, когда все объекты (агрегаты) состоят из определенного числа мономеров [3, 5, 10, 11], т.е. частиц минимального размера, возможного в данной системе, или непрерывный вариант уравнения Смолуховского [9, 34], когда в системе формально не вводятся частиц единичного размера, из которых в дальнейшем образуются более крупные. Если частицы системы могут состоять из нескольких соединений разной природы (компонент), процесс коагуляции описывается с помощью многомерного уравнения Смолуховского [37, 38].

1.2 Базовая модель коагуляции Смолуховского

Пусть $n_k(t)$ – концентрация (т.е. среднее количество частиц в единице объёма) агрегатов, из k "элементарных частиц". Уравнения Смолуховского описывают изменение n_k во времени. В процессе эволюции в системе образуются частицы всё большего и большего размера, так что система уравнений, строго говоря, бесконечна. В случае отсутствия процесса фрагментации и источников или стоков частиц, уравнения Смолуховского имеют вид:

$$\frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i} n_i n_{k-i} - n_k \sum_{i=1}^{\infty} C_{ki} n_i, \quad k = \overline{1, \infty}. \quad (1.1)$$

Первый член правой части в данных уравнениях обозначает рост концентрации частиц размера k вследствие слияний частиц размеров i и $k - i$, второй член обозначает её убыль из-за слияний частиц размера k с другими частицами. Множитель $\frac{1}{2}$ позволяет избежать "двойного" учёта слияний частиц размеров i и $k - i$. Кинетические коэффициенты C_{ij} обозначают "частоту" слияний частиц с размерами i и j . Именно в таком виде в пионерской работе 1916 года [1] Смолуховский сформулировал свою математическую модель процесса коагуляции.

Вид кинетических коэффициентов (ядер) $C_{i,j}$ определяется спецификой изучаемых систем. Из физических соображений следуют неотрицательность и симметричность ядер коагуляции [34]:

$$C_{ij} = C_{ji} \geq 0.$$

Для ряда прикладных задач (см., например, [6, 15, 34]) также является важным свойство однородности ядер коагуляции

$$C_{ki,kj} = k^\alpha C_{i,j}.$$

В качестве характеристики состояния системы в момент времени t используются средняя плотность вещества на единицу объёма

$$N(t) = \sum_{i=1}^{\infty} n_k(t)$$

и средняя масса вещества на единицу объёма

$$M(t) = \sum_{i=1}^{\infty} kn_k(t).$$

В случае, если степень однородности ядра $\alpha \leq 1$ в системе выполняется закон сохранения массы [34, 39]

$$M(t) = M(0) = \text{const}.$$

Если $\alpha > 1$ за конечный отрезок времени $t \in [0; T]$ закон сохранения массы может нарушиться: средняя масса вещества в системе может колебаться [13], убывать [34] и даже становиться бесконечной [6, 12]. В случаях, если средняя масса вещества за конечное время становится бесконечной, принято говорить, что наблюдается явление “геляции”. Считается, при геляции образуется “сверхчастица”, агрегирующая на себя всё вещество системы, обладающая бесконечной массой [6, 12]. Феномен геляции сложно исследовать и с точки зрения теории, и с точки зрения непосредственно математического моделирования.

В непрерывном случае уравнение коагуляции Смолуховского имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v C(u, v - u) n(u, t) n(v - u, t) du - \\ & - n(v, t) \int_0^\infty C(v, u) n(u, t) du. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Впервые в такой форме модель коагуляции Смолуховского была записана Гансом Мюллером [2]. Здесь $n(v, t)$ – концентрация частиц размера v на единицу объёма среды в момент времени t . Аналогично дискретному случаю, первый член в правой части здесь отвечает за появление частиц объёма v вследствие слияний частиц объёмов $v - u$ и u , а второй член за убыль частиц объёма v из-за слияний с другими.

При известном начальном условии, как в непрерывном случае $n(v, t = 0) = n_0(v)$, так и в дискретном $n_k(t = 0) = n_{k_0}$, получаем задачу Коши для уравнения коагуляции Смолуховского. Для следующих ядер

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

$$C(u, v) = u + v,$$

$$C(u, v) = uv$$

и начальных распределений

$$n_0(v) = e^{-v},$$

$$n_{k_0} = \delta_{1,k},$$

где $\delta_{i,j}$ – символ Кронекера, известны аналитические решения задачи Коши для уравнения коагуляции Смолуховского [34, 36]. Начальное условие $n_{k_0} = \delta_{1,k}$ принято называть монодисперсным [36].

Для непрерывных ограниченных ядер и некоторых множеств начальных условий доказана корректность постановки задачи Коши [39]. В случае, если непрерывное ядро при стремлении аргументов к бесконечности возрастает не

быстрее линейной функции

$$\lim_{u,v \rightarrow \infty} \frac{C(u,v)}{(1+u+v)^\alpha} = 0, \alpha < 1,$$

для некоторых классов начальных условий доказаны существование и единственность решения задачи Коши для уравнения Смолуховского [34]. В случае задачи Коши для непрерывного уравнения Смолуховского для некоторых ядер коагуляции с особенностями на координатных осях, например,

$$C(u,v) = [(u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})(u^{-\frac{1}{3}} + v^{-\frac{1}{3}})]^3$$

и некоторых классов начальных условий доказано существование решения задачи Коши [34]. Также доказана, сходимость последовательности решений задач Коши с ядрами

$$C_N(u,v) = \begin{cases} C(u,v) & u, v \in [\frac{1}{N}, N] \times [\frac{1}{N}, N] \\ 0 & u, v \notin [\frac{1}{N}, N] \times [\frac{1}{N}, N] \end{cases}$$

к решению исходной задачи Коши для уравнения Смолуховского с ядром $C(u,v)$ [34]. Для дискретного случая доказаны аналогичные результаты. В случае неотрицательного начального условия имеет место неотрицательность решения задачи Коши в любой момент времени $t > 0$ [34]. Свойство неотрицательности решения задачи Коши для уравнения Смолуховского имеет важный физический смысл – концентрация $n(v,t)$ частиц размера v на единицу объёма среды не может быть отрицательной.

Для различных классов ядер коагуляции в работе [34] доказано стремление к нулю решения уравнения Смолуховского без источников и стоков частиц. Таким образом, при выполнении свойства неотрицательности решения и закона сохранения массы общее число коагулирующих частиц $N(t)$ будет стремиться к нулю. Данный факт, имеет простую физическую интерпретацию: при сохранении общей массы вещества для образования крупных частиц требуется слияние большого числа мелких.

1.3 Математические модели, записанные с помощью уравнений типа Смолуховского

1.3.1 Модель необратимой коагуляции с источником мономеров

Если в системе существует максимальный допустимый размер частицы и источник мономеров мощности J , то уравнения Смолуховского примут вид конечной системы квадратичных дифференциальных уравнений размерности N (см., например, [5]):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dn_1}{dt} = J - n_1 \sum_{i=1}^N C_{1i} n_i \\ \frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i} n_i n_{k-i} - n_k \sum_{i=1}^N C_{ki} n_i, \quad k = \overline{2, N}. \end{array} \right. \quad (1.3)$$

В рамках этой модели рассматривается процесс необратимой коагуляции с мгновенным выводом из системы частиц размера, большего, чем N , и источником мономеров постоянной мощности J .

В стационарном виде, данные уравнения имеют форму системы квадратичных уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = J - n_1 \sum_{i=1}^N C_{1i} n_i \\ 0 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i} n_i n_{k-i} - n_k \sum_{i=1}^N C_{ki} n_i, \quad k = \overline{2, N}. \end{array} \right. \quad (1.4)$$

Стационарная форма записи соответствует решению исходной системы дифференциальных уравнений при $t \rightarrow \infty$, если этот предел существует.

При $N = \infty$ (т.е. без максимального допустимого размера частиц) в случае семейства ядер коагуляции

$$C(i, j) = i^\nu j^\mu + i^\mu j^\nu, \quad |\nu - \mu| < 1, \nu + \mu < 1, \nu, \mu \in [0, 1]$$

для уравнений данной модели в стационарной форме известно аналитическое решение [15]:

$$n_k = \sqrt{\frac{J(1 - (\nu - \mu)^2)\cos(\pi(\nu - \mu)/2)}{4\pi}} k^{-(\nu+\mu+3)/2}.$$

В работе [5] для задачи Коши с нулевым начальным условием и случая

$$|\nu - \mu| > 1, \nu + \mu < 1, \nu, \mu \in [0, 1]$$

показано существование периодического решения с осциллирующей конечной средней массой вещества. Численные эксперименты показывают, что амплитуда и период осцилляций массы растут по мере увеличения значения разности показателей $|\nu - \mu| > 1$, а также с ростом предельного размера частицы M .

1.3.2 Уравнения коагуляции-дробления

Если в системе присутствуют процессы фрагментации, в непрерывном случае уравнение коагуляции дробления имеет вид [9, 40, 41]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v C(u, v - u)n(u, t)n(v - u, t)du \\ & - n(v, t) \int_0^\infty C(v, u)n(u, t)du \\ & - \int_0^\infty \psi(u, v)n(u, t)du + \frac{n(v, t)}{v} \int_0^v u\psi(u, v)du \end{aligned} \quad (1.5)$$

Таким образом, появляется ядро $\psi(u, v)$, характеризующее процесс дробления частиц. Из физических соображений ясно, что $\psi(u, v) \geq 0$ при $u < v$ и $\psi(u, v) = 0$ при $u > v$ [9]. Так же, как и для ядер процесса агрегации, вид ядер дробления определяется особенностями рассматриваемой физической системы.

Отметим также, что процессы дробления могут быть представлены и в виде нелинейных членов, например, в случае ударных распадов частиц на осколки. Например, в планетных кольцах образование новых агрегатов происходит при парных столкновениях частиц с их последующим слиянием или дроблением на более мелкие частицы [4, 35]. В приложении к планетным кольцам Сатурна в [3] показано, что кинетические коэффициенты процесса дробления $\Psi_{i,j}$ отличаются от $C_{i,j}$ лишь мультипликативным множителем $\lambda > 0$, т.е. $\Psi_{i,j} = \lambda C_{i,j}$. В этом случае система уравнений агрегации и фрагментации имеет вид [3]:

$$\frac{dn_k(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{i,j} n_i n_j - (1 + \lambda) n_k \sum_{j \geq 1} C_{j,k} n_j, \quad k = \overline{2, \infty}. \quad (1.6)$$

При $\lambda = 0$, получим классическую систему уравнений агрегации Смолуховского. Уравнение для мономеров с учётом указанных выше процессов принимает вид:

$$\frac{dn_1}{dt} = -n_1 \sum_{j \geq 1} C_{1,j} n_j + \frac{\lambda}{2} \sum_{i,j \geq 2} C_{i,j} (i + j) n_i n_j + \lambda n_1 \sum_{j \geq 2} j C_{1,j} n_j. \quad (1.7)$$

В случае ядра $C_{ij} \equiv 1$ и $n_{k_0} = \delta_{1k}$ известно аналитическое решение указанной системы уравнений [3], при этом средняя плотность будет изменяться следующим образом:

$$N(t) = \begin{cases} \frac{2\lambda}{1+2\lambda - \exp(-\lambda t)} & \text{если } \lambda > 0 \\ \frac{2}{2+t} & \text{если } \lambda = 0. \end{cases}$$

1.3.3 Локальная модель агрегации и фрагментации в профиле почвы

Для моделирования динамики профиля почв в Междисциплинарной лаборатории математического моделирования почвенных систем института им. Докучаева используется многомасштабная математическая модель [42], в рамках которой необходимо решать кинетические уравнения агрегации и фраг-

ментации почвенных частиц:

$$\begin{aligned} \frac{dn_i}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} C_{i-j,j} n_{i-j} n_j - \sum_{j=1}^{N-i} C_{i,j} n_i n_j - \\ & - F_i n_i + \sum_{k=i+1}^N F_k n_k \frac{2}{k-1}, i = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Первый член здесь описывает рост концентрации частиц размера i вследствие слияний частиц размеров j и $i-j$, второй описывает её убыль из-за слияний частиц размера i с частицами других размеров. Таким образом, первые два члена описывают процесс агрегации частиц, а коэффициенты $C_{i-j,j}$ – ядра коагуляции следующего вида:

$$C_{i,j} = \sqrt{C} (i^{\frac{1}{3}} + j^{\frac{1}{3}})^\alpha \left(\frac{1}{i^{\frac{1}{3}}} + \frac{1}{j^{\frac{1}{3}}} \right)^\beta.$$

В ядро входят параметры липкости и прочности C, α, β , зависящие от содержания органического вещества и его гидрофобности. Так, например, массовое распределение смесей по содержанию органического вещества $B(\alpha)$ с информацией о гидрофобности $H(\alpha)$ является результатом решения локальной биологических модели микропроцессов: α – доля органического вещества в органо-минеральной смеси. Строго говоря, уравнения данной модели нельзя считать уравнениями Смолуховского, из-за особой специфики процессов, происходящих в почвенных системах. Тем не менее эта система кинетических уравнений по формальной структуре записи совпадает с уравнениями Смолуховского, следовательно, алгоритмы, разрабатываемые в рамках данной работы будут полезны для численного решения уравнений этой модели.

Процессы дробления здесь описываются третьим и четвёртым членами. Качественное отличие данной модели от уравнений агрегации и фрагментации в планетных кольцах и уравнений коагуляции-дробления заключается в унарности процесса фрагментации частиц – здесь, частицы дробятся на осколки не из-за столкновений друг с другом, а из-за собственной неустойчивости. Третий член описывает убыль концентрации частиц размера i из-за спонтанного распада на осколки вследствие их неустойчивости, а четвёртый описывает её рост вследствие появления осколков размера i из-за распада

других более крупных частиц. Максимальным допустимым размером частицы полагается число N , которое в свою очередь тоже является параметром этой модели. Коэффициенты F_k , отвечающие за интенсивность унарных распадов частиц, имеют следующий вид:

$$F_i = \begin{cases} e^{\gamma(i^{\frac{1}{3}} - CP^{\frac{1}{3}})}, & i \geq P \\ 0, & i < P \end{cases}$$

где параметры γ и P также зависят от решения локальной биологической модели микропроцессов. Смыслом, параметра P является предельный размер максимальный радиус P стабильных агрегатов, не подверженных процессу дробления на осколки.

Также уравнения данной модели могут быть записаны в стационарной форме

$$0 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} C_{i-j,j} n_{i-j} n_j - n_i \sum_{j=1}^{N-i} C_{i,j} n_j - F_i n_i + \sum_{k=i+1}^N F_k n_k \frac{k}{i(k-1)}, i = 1, 2, \dots, N. \quad (1.9)$$

Стационарный вид модели позволяет искать распределение концентраций n_i почвенных агрегатов в пределе $t \rightarrow \infty$.

Отметим, что итоговое распределение почвенных агрегатов по размерам существенно зависит от решения математической модели микробиологических процессов и не является решением задачи Коши или стационарной системы для какого-то конкретного ядра агрегации. Напротив, распределение почвенных агрегатов по размерам строится, как усреднение множества решений задач Коши (или стационарных систем) для уравнений модели со специальными весами по значениям сеточной функции, зависящей от параметра $C \in [0, 1]$. Данная сеточная функция может быть получена из решения уравнений микробиологической модели и соответствует распределению почвенных агрегатов по содержанию в них органического вещества.

1.3.4 Многокомпонентная коагуляция

Если частицы системы могут состоять из d разнородных компонент, процесс коагуляции описывает многомерное уравнение коагуляции Смолуховского. Здесь неизвестной является изменяющаяся во времени функция концентрации многокомпонентных частиц $n(v_1, \dots, v_d, t)$ с объёмами компонент (v_1, \dots, v_d) . Обозначим через $\bar{v} = (v_1, \dots, v_d)$, $\bar{u} = (u_1, \dots, u_d)$. Тогда многомерное уравнение коагуляции Смолуховского имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\bar{v}, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} C(\bar{v} - \bar{u}; \bar{u}) n(\bar{v} - \bar{u}, t) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d - \\ & - n(\bar{v}, t) \int_0^\infty \dots \int_0^\infty C(\bar{u}; \bar{v}) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d. \end{aligned} \quad (1.10)$$

Аналогично одномерному случаю из физических соображений следуют неотрицательность и симметричность ядер коагуляции

$$C(\bar{u}; \bar{v}) = C(\bar{v}; \bar{u}) \geq 0.$$

По-прежнему важным для многих прикладных задач остаётся свойство однородности ядер коагуляции

$$C(k\bar{u}; k\bar{v}) = k^\alpha C(\bar{u}; \bar{v}).$$

При известной начальной концентрации $n(\bar{v}, t = 0) = n_0(\bar{v})$ получаем задачу Коши для многомерного уравнения коагуляции Смолуховского. При $d = 2$ для ядра единичного ядра коагуляции $C(\bar{u}, \bar{v}) \equiv 1$ и начальных условий

$$n(v_1, v_2, t = 0) = a b e^{-av_1 - bv_2}$$

известны точные решения задачи Коши [37, 43]

$$n(v_1, v_2, t) = \frac{a b e^{av_1 - bv_2}}{(1 + t/2)^2} I_0 \left(2 \sqrt{\frac{a b v_1 v_2 t}{t + 2}} \right),$$

где $I_0(x)$ - модифицированная функция Бесселя нулевого порядка.

Естественным расширением уравнения многокомпонентной коагуляции Смолуховского является модель многокомпонентной необратимой коагуляции с источником и стоком частиц. Если компоненты частиц не могут превышать некоторого максимального объёма, а в системе присутствует источник новых частиц, уравнение многокомпонентной коагуляции примет следующую форму

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\bar{v}, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} K(\bar{v} - \bar{u}; \bar{u}) n(\bar{v} - \bar{u}, t) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d - \\ & - n(\bar{v}, t) \int_0^{V_{\max}} \dots \int_0^{V_{\max}} K(\bar{u}; \bar{v}) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d + J(v_1, \dots, v_d). \end{aligned} \quad (1.11)$$

В этой модели слишком крупные частицы удаляются из системы (например, вследствие гравитации), а частицы с размерами компонент (v_1, \dots, v_d) вводятся в систему при помощи источника мощности $J(\bar{v})$. Отметим, что вследствие ограничений допустимы размеров частиц решение уравнения (1.11) рассматривается на конечном множестве $\bar{v} \in [0; V_{\max}]^d$.

Глава 2

Численные методы решения уравнений типа Смолуховского

В данной главе будут приведены численные методы решения уравнений типа Смолуховского. Главу предваряет краткий раздел 2.1, содержащий необходимые сведения и обозначения теории малоранговых представлений матриц и многомерных массивов. Далее следует краткий раздел с непосредственным описанием численных алгоритмов решения рассматриваемого класса задач. Раздел содержит обзор стохастических методов решения уравнения коагуляции, описание классической схемы предиктор-корректор решения уравнения Смолуховского.

После сведений об известных методах численного решения уравнений типа Смолуховского в разделе 2.2 предлагаются новые алгоритмы численного решения данного класса задач. Новые методы основаны на использовании малопараметрических представлений матриц и многомерных массивов, а также на использовании быстрых алгоритмов линейной алгебры для ускорения шагов схемы предиктор-корректор. В разделе описаны быстрый метод решения однокомпонентного уравнения коагуляции в непрерывной форме, а также однокомпонентных моделей агрегации и дробления вещества в кольцах Сатурна и локальной модели агрегации в профиле почвы. Для математической модели агрегации и дробления вещества в кольцах Сатурна предлагается дополнительно параллельная версия быстрого алгоритма. На основе метода простой итерации и схемы ускорения Андерсона предложены также быстрые алгоритмы решений уравнений рассматриваемых моделей в стационарной форме.

В разделе 2.3 предлагается обобщение быстрых алгоритмов решения одно-

компонентных моделей для случая простейшего многокомпонентного уравнения Смолуховского на основе использования одновременного представления ядра коагуляции и численного решения в виде ТТ-разложения.

2.1 Общие сведения о быстрых алгоритмах линейной алгебры и методах малоранговой аппроксимации функций многих переменных

Основной целью данного раздела является дать краткий обзор алгоритмов и методов построения малоранговых аппроксимаций многомерных массимов. В этой главе не содержится новых результатов, но для удобства читателя мы приводим необходимую информацию о методиках, которыми мы пользуемся при построении быстрых алгоритмов решения кинетических уравнений моделей агрегации и фрагментации вещества. Гораздо более подробную информацию о методах построения малоранговых тензорных аппроксимаций можно найти, например в [44–46].

2.1.1 Скелетное разложение матрицы

Любую матрицу $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$ можно представить в виде скелетного разложения (см. например, [45])

$$A = \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha} v_{\alpha}^T = UV^T,$$

где векторы $u_{\alpha}, v_{\alpha} \in \mathbb{C}^N$, а столбцами матриц $U, V \in \mathbb{C}^{N \times R}$ являются векторы u_{α}, v_{α} соответственно. Минимально возможное число слагаемых R в таком разложении является рангом матрицы A (см. например, [45]). Имеет место постановка задачи о нахождении приближённого скелетного разложения матрицы:

$$\|A - UV^T\|_* \rightarrow \min,$$

где минимизация некоторой нормы $\|\cdot\|_*$ проводится по всевозможным скелетным разложениям с R слагаемыми. Существуют различные модификации данной задачи с дополнительными условиями на область минимизации данного функционала, например, можно искать скелетное разложение наимень-

шего ранга R , позволяющее достичь требуемого уровня точности приближения исходной матрицы A

$$\|A - UV^T\|_* \leq \varepsilon,$$

и тд (см. постановки задач, например, в работах [45, 47, 48]), а можно искать приближенное малоранговое разложение с неотрицательными элементами матриц U, V .

В случае $\|\cdot\|_2$ и $\|\cdot\|_F$ известно, что наилучшей аппроксимацией ранга R является “укороченное” сингулярное разложение (SVD) матрицы (см., например, [45]).

Важным достоинством матриц, приближаемых матрицами малого ранга, является возможность построения быстрых алгоритмов, основанных на использовании этого свойства. Например, умножение матрицы ранга R , представленной в виде скелетного разложения, на вектор можно провести за $O(NR)$ арифметических операций вместо исходных $O(N^2)$. Также быстро за $O(NR^2)$ операций умножения вместо $O(N^3)$ можно получить решения системы линейных алгебраических уравнений в смысле наименьших квадратов

$$\|Ax - b\|_2 \rightarrow \min,$$

если матрица A представима в виде скелетного разложения длины R . В случае $R \ll N$ эти алгоритмы являются гораздо более быстрыми, чем классические методы умножения матриц на векторы или методы решения линейных систем, не использующие малоранговую структуру матрицы A .

Классическим и робастным методом получения малорангового представления матриц является SVD-разложение, однако его высокая алгоритмическая сложность (а именно $O(N^3)$ операций) делает практически невозможным его применение в случае, если размерность N матрицы A высока. Альтернативой использованию SVD-разложения является алгоритм крестовой матричной интерполяции, основанный на использовании принципа максимальных объёмов [49, 50] предложенный в [47]. Главным достоинством алгоритма крестовой интерполяции является возможность построения малорангового представления матрицы A без загрузки в память всех её элементов – для работы этого метода достаточно лишь $O(NR)$ ячеек памяти и $O(NR)$ вычислений элементов матрицы A . Несмотря на то, что оптимальность ске-

летнего разложения, получаемого с помощью крестового метода, не гарантируется, в работах [49, 50] даны оценки относительной погрешности результата и сопоставление этих оценок с оценками точности наилучших разложений ранга R . Эффективная параллельная реализация крестового алгоритма матричной интерполяции была предложена в работе [51].

Алгоритм матричной крестовой интерполяции зарекомендовал себя в качестве надёжного инструмента при решении ряда прикладных задач из самых разных областей: при решении кинетических уравнений агрегации и фрагментации [22, 23], для построения малоранговых тензорных аппроксимаций [48, 52], при решении интегральных уравнений [53–55], при решении задач молекулярной динамики [56] и др. [57–59]

2.1.2 Тензорные разложения

При построении малоранговых матричных аппроксимаций естественным образом происходит разделение переменных функции $A(i, j)$

$$A(i, j) = \sum_{\alpha=1}^R u_{\alpha}(i)v_{\alpha}(j),$$

где $u_{\alpha}(i)v_{\alpha}(j)$ – факторы разложения матрицы $A(i, j)$. Идеи разделения переменных также лежат и в основе тензорных разложений. В этой работе под словом **тензор** мы подразумеваем d -мерный массив $A(i_1, \dots, i_d)$, $i_1 = 1, \dots, N_1, i_d = 1, \dots, N_d$. В рамках данной терминологии матрицы – это тензоры размерности $d = 2$. Виды тензорных разложений и алгоритмы их построения, которые приводятся ниже, основываются на идеях представления d -мерных тензоров в виде разложений с разделёнными переменными.

Основной целью данного раздела является краткий обзор свойств двух видов тензорных разложений: **канонического** разложения и разложения в виде **тензорного поезда**. Каждое из представленных разложений обладает своими недостатками и преимуществами, речь о которых пойдёт ниже. Конечно, существуют также и другие виды тензорных разложений, например, разложение **Таккера**, разложение в виде “**тензорного кольца**” [60] и другие [61, 62], однако для построения численных алгоритмов и доказательства утверждений о структуре решения будут использоваться только канониче-

ское разложение и формат тензорного произведения. В последующих главах данной работы будут предложены новые алгоритмы быстрого вычисления многомерных интегральных операторов, основанные на использовании малоранговых представлений используемых массивов в формате тензорного произведения.

Каноническое разложение тензора

Естественным обобщением матричного скелетного разложения на d -мерный случай является **каноническое** тензорное разложение (гораздо более подробный обзор существующих видов тензорных разложений дан, например, в [44]):

$$A(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha=1}^R u_{1,\alpha}(i_1) \dots u_{d,\alpha}(i_d). \quad (2.1)$$

Любой тензор размерности d можно представить в виде канонического разложения с конечным числом слагаемых R [44]¹. Минимально возможное число слагаемых R в разложении (2.1) называется каноническим тензорным рангом тензора $A(i_1, \dots, i_d)$

$$\text{trank}(A) = \arg \min \left(R : A(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha=1}^R u_{1,\alpha}(i_1) \dots u_{d,\alpha}(i_d) \right).$$

Основным достоинством канонического разложения тензора в случае небольшого числа R является возможность “сжатия” данных – если для хранения исходного тензора требуется $O(N^d)$ ячеек памяти, то для хранения и работы с тензором в виде канонического разложения потребуется лишь $O(dNR)$ ячеек! Важным примером тензора с малым каноническим рангом является

¹Если многомерную функцию $A(x_1, \dots, x_d)$, где $x_k \in [x_{k,\min}, x_{k,\max}]$ можно представить в виде разложения с разделенными переменными

$$A(x_1, \dots, x_d) = \sum_{\alpha=1}^R u_{1,\alpha}(x_1) \dots u_{d,\alpha}(x_d), \quad (2.2)$$

то ранги тензоров, соответствующих сеточным функциям $A(i_1, \dots, i_d) = A(x_{1,i_1}, \dots, x_{d,i_d})$, где x_{k,i_k} – узлы сетки для отрезка $[x_{k,\min}, x_{k,\max}]$, будут равны R , поэтому в главе 3 будут доказаны оценки рангов для некоторых классов **функций**, а не **тензоров**.

следующий d -мерный тензор

$$L = a \otimes a \otimes \dots \otimes a \otimes b + a \otimes a \otimes \dots \otimes b \otimes a + b \otimes a \otimes \dots \otimes a,$$

$$a = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{trank}(L) = d.$$

Задача точного вычисления канонического тензорного ранга является NP -полной [63] и, может быть сведена к проверке полиномиальной системы вида (2.1) из $N_1 \times N_2 \dots \times N_d$ уравнений для каждого элемента тензора на разрешимость за конечное (хотя и очень большое!) число арифметических операций [64]. Лишь в очень редких случаях с помощью методов компьютерной алгебры возможно автоматически и точно вычислить канонические ранги тех или иных тензоров (например, на практике вычислимыми являются ранги тензора (2.3) лишь в случаях $d = 3$ и $d = 4$ [65], в случае произвольного значения d математическое доказательство утверждения $\text{trank}(L) = d$ требует дополнительной подготовки, см. например, [64]). Кроме астрономической вычислительной сложности важным недостатком методологии вычисления канонического тензорного ранга является отсутствие возможности так же точно строить непосредственно каноническое разложение требуемого ранга.

Задачу о поиске канонического разложения тензора можно поставить и в приближённой форме:

$$A(i_1, \dots, i_d) \approx A_R = \sum_{\alpha=1}^R u_{1,\alpha}(i_1) \dots u_{d,\alpha}(i_d),$$

$$\|A - A_R\|_* < \varepsilon.$$

Для получения оценок значений R канонических рангов тензоров существует большое количество численных методов, которые также позволяют и строить приближенные канонические разложения рассматриваемых тензоров.

Конечно, существует и большое количество примеров тензоров A , чьи канонические ранги $\text{trank}(A) \gg N$, даже тензоры ранга N^{d-1} . Важным недостатком канонического разложения и канонического ранга с точки зрения численных методов является и их неустойчивость к возмущениям – известны

примеры тензоров ранга R , в любой ε -окрестности которых существуют тензоры отличного ранга. Например, для $d = 3$ в любой ε -окрестности тензора (2.3) содержится тензор ранга 2 [44, 64]:

$$S(\varepsilon) = (a + \varepsilon b) \otimes (a + \varepsilon b) \otimes (a + \varepsilon b), \quad \text{trank}(S(\varepsilon)) = 1,$$

$$L = \frac{1}{\varepsilon}S(\varepsilon) - \frac{1}{\varepsilon}S(0) + O(\varepsilon).$$

Отметим, что в случае матричных разложений (то есть $d = 2$) в любой ε -окрестности матрицы ранга R существуют лишь матрицы ранга $\tilde{R} \geq R$, а в случае $d > 2$ в любой ε -окрестности исходного тензора могут быть тензоры, как меньшего, так и большего ранга, поэтому, задачу о вычислении канонического тензорного ранга особенно трудно решать численно.

Дополнительной трудностью при численном построении непосредственно канонических тензорных разложений является риск неограниченного роста элементов, используемых массивов, а также отсутствие обоснованных критериев сходимости численных методов.

Существуют альтернативы представления тензора в виде канонического разложения, алгоритмы построения которых являются гораздо более робастными и менее вычислительно требовательными, чем алгоритмы построения канонического тензорного разложения. Об одном таком разложении и пойдёт речь далее.

Разложение в формате тензорного поезда

Ещё одним важным видом тензорных разложений является разложение в виде тензорного поезда (ТТ-формат) [46]. Тензор $f(i_1, \dots, i_d)$ представим в виде тензорного поезда, если справедливо следующее тождество

$$f(i_1, \dots, i_d) = \sum_{\alpha_0=1}^{r_0} \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \dots \sum_{\alpha_d=1}^{r_d} f_1(\alpha_0, i_1, \alpha_1) \dots f_d(\alpha_{d-1}, i_d, \alpha_d). \quad (2.3)$$

Индексы α_i принято называть ранговыми, числа r_1, r_2, \dots, r_d – тензорными рангами, среди которых $r_0 = r_d = 1$. Функции $f_k(\alpha_{k-1}, i_k, \alpha_k)$ – ядра (вагоны) ТТ-разложения. Если $i_1 = 1, 2 \dots N$, $i_2 = 1, 2 \dots N$, $i_d = 1, 2 \dots N$, для хранения тензора $f(i_1, \dots, i_d)$, представленного в виде ТТ-разложения требуется

$O(dNR^2)$ ячеек памяти вместо исходных $O(N^d)$, где

$$R = \max(r_1, r_2, \dots, r_d).$$

Вычисление элемента тензора, представленного в виде ТТ-разложения может быть выполнено за $O(dR^2)$ операций умножения с помощью d умножений матриц размеров $R \times R$ на векторы размера R . Отметим, что из малости ранга канонического разложения тензора $f(i_1, \dots, i_d)$ автоматически следует существование малорангового представления этого же тензора в ТТ-формате [46]. Обратное же, вообще говоря, неверно, например, точный канонический ранг тензора L из формулы 2.3 в случае $d = 3$ равен трём, а его точные ТТ-ранги равны двум [66].

Доказано, что любой d -мерный тензор можно представить в виде ТТ-разложения с конечными рангами [66]. Для широкого класса функций (многотомерные экспоненты, тригонометрические функции, полиномы) известны точные значения или оценки рангов соответствующих ТТ-разложений, являющиеся малыми числами. Кроме того, можно рассматривать задачу о построении приближённого ТТ-разложения целевой функции $f(i_1, \dots, i_d)$ с точностью ε :

$$f(i_1, \dots, i_d) \approx \tilde{f} = \sum_{\alpha_0=1}^{r_0} \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \dots \sum_{\alpha_d=1}^{r_d} \tilde{f}_1(\alpha_0, i_1, \alpha_1) \dots \tilde{f}_d(\alpha_{d-1}, i_d, \alpha_d), \quad (2.4)$$

$$\|f - \tilde{f}\|_* < \varepsilon,$$

где $\|\cdot\|_*$ может быть, например, $\|\cdot\|_F$. Задача о поиске приближенного ТТ-разложения с точностью ε может быть модифицирована в задачу о поиске наилучшего приближения тензора $f(i_1, \dots, i_d)$ с фиксированными или ограниченными рангами r_k .

Если вычисления элементов тензора $f(i_1, \dots, i_d)$ можно производить в любой точке (i_1, \dots, i_d) , аппроксимацию рассматриваемого тензора в ТТ-формате можно построить с помощью ТТ-крестового метода. ТТ-крестовый метод [48], основывающийся на использовании матричного крестового метода [47], позволяет получить приближенное разложение тензора в ТТ-формате за $O(dNR^3)$ локальных вычислений элементов тензора $f(i_1, \dots, i_d)$. Суще-

Таблица 2.1: Сложности некоторых операций в ТТ-формате

Операция	Сложность
ТТ-крестовый метод построения разложения	$O(dNR^3)$
Вычисление элемента тензора	$O(dR^2)$
Поэлементное сложение двух тензоров	$O(dNR^2)$, ранг суммы равен сумме рангов
Поэлементное умножение двух тензоров	$O(dNR^4)$, ранг результата равен перемножению рангов сомножителей
Поэлементное умножение через ТТ-крестовый метод	$O(d^2NR^5)$, на практике ранги часто меньше перемноженных рангов сомножителей
Поэлементное сложение через ТТ-крестовый метод	$O(d^2NR^5)$, на практике ранги часто меньше суммы рангов слагаемых

ствуют эффективные методики округления приближённых ТТ-разложений, а также реализация тензорной арифметики над многомерными массивами в ТТ-формате [46, 48, 66]. Сложности некоторых операций приведены в Таблице 2.1, детали получения приведены, например, в работе [46].

2.2 Численные методы решения уравнений однокомпонентной коагуляции - дробления

2.2.1 Методы Монте-Карло в применении к уравнению Смолуховского

Основной целью данного раздела является краткий обзор известных методов Монте Карло, используемых для математического моделирования процессов коагуляции и дробления вещества. Методы Монте Карло являются распространённым инструментом математического моделирования процессов коагуляции и дробления вещества [16, 17, 19, 20, 37]. Важным достоинством этих методов является их наглядность с физической точки зрения и, как следствие, простота реализации.

В этой главе мы рассмотрим несколько методов Монте Карло в применении к решению многокомпонентного уравнения Смолуховского:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(\bar{v}, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} C(\bar{v} - \bar{u}; \bar{u}) n(\bar{v} - \bar{u}, t) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d - \\ & - n(\bar{v}, t) \int_0^\infty \dots \int_0^\infty C(\bar{u}; \bar{v}) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d. \end{aligned}$$

Основная идея методов Монте Карло состоит в построении ансамбля численных частиц, моделирующих реальные частицы. Каждой численной частице d -компонентной среды поставим в соответствие d -мерный вектор значений размеров компонент (масс, объемов) $\bar{v} = (v_1, v_2, \dots, v_d)$. Физика взаимодействия частиц в данном случае описывается ядром коагуляции – функцией $C(\bar{u}, \bar{v})$. Поэтому определяющими качество метода параметрами в данном случае являются

- Метод отбора пар, коагулирующих частиц
- Подход к вычислению временного шага при слиянии очередной пары частиц

Далее мы рассмотрим два примера методов, различающихся способом выбора коагулирующих пар: метод Круиса (Fast DSMC method) и метод Метрополиса, но для начала обсудим вопрос выбора временного шага.

Вычисление момента времени, соответствующего очередному слиянию частиц есть вопрос, достойный отдельного исследования. Существует подход, описанный в [67], где использовались экспоненциально распределенные шаги по времени, но известен и подход, основанный на вычислении сумм, предложенный в [16]. В работе [16] время между двумя слияниями вычисляется как

$$\tau = \frac{2}{\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N C_{i,j}} \quad (2.5)$$

где $C_{i,j} = C(\bar{u}_i, \bar{v}_j)$ – значение ядра коагуляции для частиц с номерами i и j . Кажется, что при таком определении временного шага потребуется вычислять двойные суммы на каждой итерации метода, но в [16] предложена оптимизация данных вычислений, основанная на наблюдении, что на каждом

шаге алгоритма происходит слияние лишь одной пары частиц, что не сильно меняет состояние системы в целом. Рассмотрим теперь метод выбора пар, предложенный в [16], а также указанную оптимизацию вычисления шага.

Метод моделирования процесса коагуляции Fast Direct Simulation Monte Carlo Method (Fast DSMC), описанный в работе [16] использует оптимизированную по количеству используемой памяти технику отбора пар. Критерием выбора пары частиц (i, j) является выполнение следующего неравенства:

$$\sum_{k=1}^i \sum_{l=1}^j C_{k,l} \leq R \sum_{k=1}^N \sum_{l=1}^N C_{k,l} \leq \sum_{k=1}^i \sum_{l=1}^{j+1} C_{k,l},$$

где R – реализация равномерно распределённой на отрезке $[0, 1]$ величины. После выбора пары происходит слияние частиц и обновляется счётчик времени по вычисленному временному шагу.

Модификация алгоритма, позволяющая хранить информацию о значениях ядер в массиве, равным по размеру количеству частиц, заключается в хранении не всех значений ядер по отдельности, а сумм следующего вида:

$$S_i = \sum_{l=1, l \neq i}^N C_{i,l}.$$

Тогда процесс выбора пары можно разбить на два этапа:

1. Согласно условию

$$\sum_{k=1}^{i-1} S_k \leq R \sum_{k=1}^N S_k \leq \sum_{k=1}^i S_k$$

выбирается индекс i .

2. Согласно условию

$$\sum_{k=1}^{i-1} S_k + \sum_{l=1, l \neq i}^{j-1} C_{i,l} \leq R \sum_{k=1}^N S_k \leq \sum_{k=1}^{i-1} S_k + \sum_{l=1, l \neq i}^j C_{i,l}$$

выбирается индекс j .

После слияния частиц значения S_k не пересчитываются полностью, а мо-

дифицируются согласно изменившимся значениям ядер для новой частицы. В результате временной шаг (одно слияние) по формуле (2.5) можно выполнить за $O(N)$ операций, где N – число используемых частиц в ансамбле. Тем не менее, начальная инициализация алгоритма с предварительным вычислением сумм S_k потребует $O(N^2)$ операций.

Основным недостатком данного алгоритма является необходимость предварительно вычислить все значения ядра коагуляции по используемому ансамблю частиц, что может составить основное время работы метода. Возможным решением данной проблемы является реализация алгоритма Метрополиса.

Алгоритм Метрополиса также основан на технике “приема-отбраковки” взаимодействующих пар частиц, но критерий выбора здесь основан на использовании цепей Маркова, то есть выбор каждой следующей пары зависит только от выбора предыдущей пары (алгоритм не сохраняет историю процесса). Такой критерий выбора пар взаимодействующих частиц позволяет производить выбор пары очень быстро. На первом этапе случайным образом выбирается пара взаимодействующих частиц u и v . Каждая следующая пара частиц u' и v' выбирается согласно критерию:

$$\frac{C(\bar{u}', \bar{v}')}{C(\bar{u}, \bar{v})} \geq R,$$

где R – реализация равномерной распределённой случайной величины на отрезке $[0, 1]$. Выбор временного шага τ между слияниями частиц в данном алгоритме можно производить, например, так же, как в методе Fast DSMC.

Одним из недостатков рассмотренных выше методов является отождествление численной и физической частиц. Это приводит к тому, что при моделировании на достаточно большом промежутке времени количество численных частиц убывает (в силу слипания), что снижает репрезентативность выборки при гистограммировании функции распределения, а следовательно и точность численного решения.

Во избежание перечисленных проблем Бабовский (Babovsky) в [68], Вагнер и Эйбек (Wagner and Eibeck) в [18] ассоциируют с одной частицей одну единичную массу размером $y_i(t)$ в момент времени t . Такая частица представляет собой $1/y_i(t)$ физических частиц размером y_i в момент времени t . В

таком случае, численное решение удовлетворяет закону сохранения массы, и число численных частиц N тоже сохраняется. Семейство методов Монте Карло, аналогичных методам, из работ [17, 18, 68] называются методами потока масс (Mass Flow methods).

Отметим также, что при обзоре перечисленных методов Монте Карло мы не рассматривали возможные техники, позволяющие ускорить их работу в десятки раз. Так алгоритм, разработанный Эйбеком и Вагнером в работе [18], после применения некоторых алгоритмических приёмов из работы [69] позволяет решать обобщённое пятикомпонентное уравнение Смолуховского с приемлемой точностью порядка $1 - 2\%$ в терминах интегральных характеристик решения (полная масса, полная плотность и др.) менее, чем за минуту [70].

Важным недостатком решения, полученного при помощи методов Монте Карло, являются трудности с измерением его точности в сильных нормах, например, $\|\cdot\|_C, \|\cdot\|_2$. Так, даже в случае двухкомпонентного уравнения Смолуховского, при использовании 10^6 частиц невозможно построить качественную гистограмму решения для сетки из 1000×1000 узлов – вероятно, даже не для каждого узла сетки будет существовать соответствующая ему частица. При этом решение, полученное с помощью методов Монте Карло, может с высокой точностью приближать физически важные интегральные характеристики решения, такие как полное число частиц или полная масса коагулирующего вещества на единицу объёма среды.

2.2.2 Разностные методы численного решения уравнения Смолуховского

Альтернативой стохастическим методам при численном моделировании процессов коагуляции и дробления вещества является использование конечно-разностных схем. Основными достоинствами разностной методологии являются её высокая теоретическая обоснованность и гораздо более высокая точность, основным недостатком является высокая алгоритмическая сложность. Так, даже для моделирования процессов коагуляции и дробления однокомпонентных частиц исследователи часто предпочитают использовать более простые и физически ясные методы Монте Карло [16–18].

Основной целью данного раздела является сформулировать новые эф-

фективные разностные методы решения уравнений математических моделей агрегации и дробления вещества, основанные на использовании малопараметрических представлений многомерных массивов для ускорения классической разностной схемы предиктор-корректор. Ранее, малоранговые разложения массивов в формате тензорного поезда уже использовались для ускорения шагов разностной схемы Эйлера при решении трёхкомпонентной модели популяционного баланса [38]. В этой работе мы предлагаем методику ускорения схемы более высокого порядка точности.

Схема предиктор-корректор

В данной секции мы приводим описание явной разностной схемы предиктор - корректор (схема Рунге-Кутта второго порядка) для решения задачи Коши для многокомпонентного уравнения Смолуховского (1.10).

Сузим бесконечную многомерную область $\bar{v} \in [0, \infty) \times \dots [0, \infty)$ до области $\bar{v} \in [V_{\min}, V_{\max}] \times \dots [V_{\min}, V_{\max}]$ и введём по каждому из направлений равномерную сетку из $N + 1$ узлов с шагом $h = \frac{V_{\max} - V_{\min}}{N}$. Введём отдельно равномерную сетку по времени с шагом τ . Тогда схема предиктор - корректор примет вид:

$$\frac{n^{k+\frac{1}{2}} - n^k}{0.5\tau} = L_1(n^k) - n^k L_2(n^k) \quad (2.6)$$

$$\frac{n^{k+1} - n^k}{\tau} = L_1(n^{k+\frac{1}{2}}) - n^{k+\frac{1}{2}} L_2(n^{k+\frac{1}{2}}),$$

где $n^k, n^{k+\frac{1}{2}}$ – массивы значений численного решения в узлах сетки, а L_1, L_2 – сеточные аппроксимации интегральных операторов из уравнения (1.10) методом трапеций. В случае однокомпонентного уравнения, L_1, L_2 имеют следующий вид:

$$L_{1_i}n = \frac{h}{2} \sum_{i_1=1}^i (C(v_{i-i_1}; v_{i_1})n(v_{i_1})n(v_{i-i_1}) + C(v_{i-i_1+1}; v_{i_1-1})n(v_{i_1-1})n(v_{i-i_1+1})),$$

$$i = 1, 2, \dots, N$$

$$L_{1_0}n = 0,$$

$$L_{2_i}n = \frac{h}{2}C(v_i; v_0)n(v_0) + h \sum_{i_1=1}^{N-1} (C(v_i; v_{i_1})n(v_{i_1})) + \frac{h}{2}C(v_i; v_N)n(v_N),$$

$$i = 0, 1, \dots, N,$$

а в случае двухкомпонентной задачи:

$$L_{1_{i,j}}n = \frac{h_1 h_2}{4} \sum_{i_1=1}^i \sum_{j_1=1}^j (n(v_{i_1}, v_{j_1})n(v_{i-i_1}, v_{j-j_1})C(v_{i-i_1}, v_{j-j_1}; v_{i_1}, v_{j_1}) +$$

$$+ n(v_{i_1-1}, v_{j_1})n(v_{i-i_1+1}, v_{j-j_1})C(v_{i-i_1+1}, v_{j-j_1}; v_{i_1-1}, v_{j_1}) +$$

$$+ n(v_{i_1}, v_{j_1-1})n(v_{i-i_1}, v_{j-j_1+1})C(v_{i-i_1}, v_{j-j_1+1}; v_{i_1}, v_{j_1-1}) + \quad (2.7)$$

$$+ n(v_{i_1-1}, v_{j_1-1})n(v_{i-i_1+1}, v_{j-j_1+1})C(v_{i-i_1+1}, v_{j-j_1+1}; v_{i_1-1}, v_{j_1-1})),$$

$$i, j = 1, 2, \dots, N,$$

$$L_{1_{i,0}}n = 0, i = 0, 1, \dots, N,$$

$$L_{1_{0,j}}n = 0, j = 0, 1, \dots, N,$$

$$L_{2_{i,j}}n = \frac{h_1 h_2}{2} \left(\sum_{i_1=1}^{N-1} C(v_i, v_j, v_{i_1}, v_0)n(v_{i_1}, v_0) + \sum_{i_1=1}^{N-1} C(v_i, v_j, v_{i_1}, v_N)n(v_{i_1}, v_N) + \right.$$

$$+ \sum_{j_1=1}^{N-1} C(v_i, v_j, v_0, v_{j_1})n(v_0, v_{j_1}) + \sum_{j_1=1}^{N-1} C(v_i, v_j, v_N, v_{j_1})n(v_N, v_{j_1})) +$$

$$+ \frac{h_1 h_2}{4} (C(v_i, v_j, v_0, v_0)n(v_0, v_0) + C(v_i, v_j, v_0, v_N)n(v_0, v_N) + \quad (2.8)$$

$$+ C(v_i, v_j, v_N, v_0)n(v_N, v_0) + C(v_i, v_j, v_N, v_N)n(v_N, v_N)) +$$

$$+ h_1 h_2 \sum_{i_1=1}^{N-1} \sum_{j_1=1}^{N-1} C(v_i, v_j, v_{i_1}, v_{j_1})n(v_{i_1}, v_{j_1}).$$

Приведённая схема обеспечивает второй порядок аппроксимации по времени

и по объёмам $\psi = O(h_{v_1}^2 + \dots + h_{v_d}^2 + \tau^2)$, а сложность каждого шага по времени составит $O(N^2)$ арифметических операций в случае однокомпонентной задачи и $O(N^4)$ для двухкомпонентной. В d -компонентном случае сложность вычисления интегральных операторов методом трапеций, напрямую из многомерных аналогов формул (2.7) - (2.8) по всем узлам сетки составит $O(N^{2d})$ операций, а непосредственное осуществление шага схемы $O(N^d)$ операций.

Экспоненциальный рост сложности описанного метода с ростом d делает его неприменимым для решения многомерных задач. Даже в одномерном случае схема предиктор - корректор проигрывает по эффективности широко используемым методам Монте Карло для прямого моделирования процесса коагуляции [16, 17]. Основной целью следующих разделов является построение методов численного решения многомерного уравнения Смолуховского с меньшей сложностью шага разностной схемы по количеству арифметических операций.

Быстрый разностный метод решения уравнения коагуляции в непрерывной форме

В этом разделе мы формулируем быстрый разностный метод решения задачи Коши для непрерывного уравнения коагуляции Смолуховского:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(v, t)}{\partial t} = & \frac{1}{2} \int_0^v C(u, v-u) n(u, t) n(v-u, t) du - \\ & - n(v, t) \int_0^\infty C(v, u) n(u, t) du. \end{aligned}$$

Далее мы формулируем быстрые методы вычисления нелинейных интегральных операторов из правой части рассматриваемого уравнения, а также их применение для ускорения шагов разностной схемы предиктор-корректор.

Быстрое вычисление интегральных операторов 1. Опишем в этом разделе быстрый метод приближённого вычисления значений функций вида

$$q(v) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} f(v-u)g(u)du, \quad (2.9)$$

на некотором отрезке $v \in [V_{min}; V_{max}]$, где $f(u), g(u)$ – известные функции, определённые на том же отрезке.

Введем на рассматриваемом отрезке равномерную сетку и выпишем аппроксимацию (2.9) с помощью квадратурной формулы трапеций:

$$\begin{aligned} q(v_i) &= \int_{V_{min}}^{v_i} f(v-u)g(u)du \approx \\ &\approx \frac{h}{2} \sum_{i_1=1}^i (f(v_{i-i_1})g(v_{i_1}) + f(v_{i-i_1+1})g(v_{i_1-1})) = \\ &= h \sum_{i_1=0}^i f(v_{i-i_1})g(i_1) - \frac{h}{2}(f(v_i)g(v_0) + f(v_0)g(v_i)), \quad (2.10) \\ i &= \overline{1, N}, \\ q(v_0) &= 0. \end{aligned}$$

Вычисление значений $q(v_i)$ по всей сетке напрямую из формулы (2.10) потребует $O(N^2)$ операций.

Обозначим через

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^T &= [q(v_0), q(v_1), \dots, q(v_N)], \\ \mathbf{g}^T &= [g(v_0), g(v_1), \dots, g(v_N)], \end{aligned} \quad (2.11)$$

$$\widehat{T}(f) = \begin{bmatrix} f(v_0) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f(v_1) & f(v_0) & 0 & 0 & 0 \\ f(v_2) & f(v_1) & f(v_0) & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ f(v_N) & f(v_{N-1}) & \dots & \dots & f(v_0) \end{bmatrix}, \quad (2.12)$$

$$\widehat{T}'(f) = \begin{bmatrix} 2f(v_0) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ f(v_1) & f(v_0) & 0 & 0 & 0 \\ f(v_2) & 0 & f(v_0) & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ f(v_N) & 0 & \dots & 0 & f(v_0) \end{bmatrix}. \quad (2.13)$$

Используя (2.11) - (2.13), (2.10) можно переписать в виде:

$$\mathbf{q} = (h\widehat{T}(f) - \frac{h}{2}\widehat{T}'(f))\mathbf{g} = h\widehat{T}(f)\mathbf{g} - \frac{h}{2}\widehat{T}'(f)\mathbf{g}. \quad (2.14)$$

Заметим, что $\widehat{T}(f)$ – нижнетреугольная матрица Теплица, а, значит, её можно умножить на вектор \mathbf{g} за $O(N \log N)$ операций (см. например, [45]), а матрицу $\widehat{T}'(f)$ можно умножить на вектор \mathbf{g} за $O(N)$ операций. В результате, мы получили алгоритм, позволяющий вычислить значения $q(v_i)$ для всех $N+1$ узлов $v_i (i = \overline{0, N})$ за $O(N \log N)$ операций.

Быстрое вычисление интегральных операторов 2. В этом разделе опишем быстрый метод приближённого вычисления значений функций вида

$$q(v) = \int_{V_{min}}^{V_{max}} C(v, u)f(u)du, \quad (2.15)$$

где $v \in [V_{min}; V_{max}]$, $u \in [V_{min}; V_{max}]$, $C(u, v)f(u)$ – известные функции. Введём на рассматриваемом отрезке равномерную сетку и выпишем аппроксимацию (2.15) с помощью квадратурной формулы трапеций:

$$q(v_i) \approx \frac{h}{2}C(v_i, v_0)f(v_0) + h \sum_{i_1=1}^{N-1} (C(v_i, u_{i_1})f(u_{i_1})) + \frac{h}{2}C(v_i, v_N)f(v_N). \quad (2.16)$$

Приближённое вычисление (2.15) по формуле (2.16) по всей сетке потребует $O(N^2)$ арифметических операций. Обозначим через

$$\widehat{K} = \begin{bmatrix} \frac{h}{2}C(v_0, u_0) & hC(v_0, u_1) & \dots & hC(v_0, u_{N-1}) & \frac{h}{2}C(v_0, u_N) \\ \frac{h}{2}C(v_1, u_0) & hC(v_1, u_1) & \dots & hC(v_1, u_{N-1}) & \frac{h}{2}C(v_1, u_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{h}{2}C(v_N, u_0) & hC(v_N, u_1) & \dots & hC(v_N, u_{N-1}) & \frac{h}{2}C(v_N, u_N) \end{bmatrix}, \quad (2.17)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{q}^T &= [q(v_0) \quad q(v_1) \quad \dots \quad q(v_N)], \\ \mathbf{f}^T &= [f(v_0) \quad f(v_1) \quad \dots \quad f(v_N)]. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Используя (2.17) - (2.18), (2.16) можно переписать в виде:

$$\mathbf{q} = \widehat{K}\mathbf{f}. \quad (2.19)$$

При наличии хорошей малоранговой аппроксимации для матрицы $\widehat{K} \approx UV^T$, где U, V – матрицы размера $N \times R$, $R \ll N$, приближённое вычисление (2.15) по всей сетке можно провести за $O(NR)$ операций вместо исходных $O(N^2)$.

Ускорение исходной разностной схемы Предположим, что ядро коагуляции можно приблизить суммой вида:

$$C(u, v) \approx \sum_{\alpha=1}^R U_{\alpha}(u)V_{\alpha}(v), \quad (2.20)$$

тогда первый интегральный оператор из непрерывного уравнения Смолуховского можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_0^v n(v-u, t)n(u, t)C(v-u; u)du \approx \\ & \approx \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^R \int_0^v U_{\alpha}(v-u)n(v-u, t)V_{\alpha}(u)n(u, t)du = \\ & = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^R \int_0^v \widetilde{U}_{\alpha}(v-u, t)\widetilde{V}_{\alpha}(u, t)du, \end{aligned} \quad (2.21)$$

где

$$\begin{aligned}\widetilde{U}_\alpha(u, t) &\equiv U_\alpha(u)n(u, t) \\ \widetilde{V}_\alpha(u, t) &\equiv V_\alpha(u)n(u, t).\end{aligned}$$

Заметим, что в (2.21), имеем сумму из R интегралов вида (2.9), быстрый алгоритм приближённого вычисления которых описан выше, а быстрый алгоритм приближённого вычисления второго интегрального оператора из непрерывного уравнения коагуляции Смолуховского также описан выше (см. выражения (2.17) – (2.19) и пояснения к ним).

В результате, если вычислять аппроксимации интегральных операторов L_{1_i}, L_{2_i} с помощью описанных выше быстрых алгоритмов, то арифметическая сложность шага разностной схемы снизится с $O(N^2)$ до $O(RN \log N)$ арифметических операций. Отметим дополнительно, что для построения приближений вида (2.20) в данной работе будет использоваться крестовый алгоритм интерполяции, описанный в работе [47].

Быстрый разностный метод решения уравнений модели агрегации и дробления вещества в планетных кольцах

В этом разделе мы сформулируем численный метод решения уравнений дискретной модели однокомпонентной коагуляции на примере модели агрегации и фрагментации частиц в планетных кольцах [3]:

$$\frac{dn_k(t)}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{i,j} n_i n_j - (1 + \lambda) n_k \sum_{j \geq 1} C_{j,k} n_j, \quad k = \overline{2, \infty} \quad (2.22)$$

$$\frac{dn_1}{dt} = -n_1 \sum_{j \geq 1} C_{1,j} n_j + \frac{\lambda}{2} \sum_{i,j \geq 2} C_{i,j} (i + j) n_i n_j + \lambda n_1 \sum_{j \geq 2} j C_{1,j} n_j.$$

Отметим, что описываемая ниже схема легко адаптируется к уравнениям других дискретных моделей, сформулированных выше.

Аппроксимируем исходную бесконечную систему дифференциальных уравнений конечной системой из тех же уравнений при $k = \overline{1, M}$. Запишем уравнение (2.22) в операторной форме

$$\begin{cases} \frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathbf{S}(n(t)) \\ \mathbf{n}(0) = \mathbf{n}_0 \end{cases}, \quad (2.23)$$

где

$$\begin{aligned} \mathbf{n}^T(t) &= [n_1(t) \quad n_2(t) \quad \dots \quad n_M(t)], \\ \mathbf{n}_0^T &= [n_{0_1} \quad n_{0_2} \quad \dots \quad n_{0_M}], \end{aligned}$$

$$\mathbf{S}(n) = \begin{bmatrix} -n_1 \sum_{j \geq 1}^M C_{1,j} n_j + \frac{\lambda}{2} \sum_{i,j \geq 2}^{i,j \leq M} C_{i,j} (i+j) n_i n_j + \lambda n_1 \sum_{j \geq 2}^M j C_{1,j} n_j \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=2} C_{i,j} n_i n_j - (1+\lambda) n_2 \sum_{j \geq 1} C_{j,2} n_j \\ \dots \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{i,j} n_i n_j - (1+\lambda) n_k \sum_{j \geq 1} C_{j,k} n_j \\ \dots \\ \frac{1}{2} \sum_{i+j=M} C_{i,j} n_i n_j - (1+\lambda) n_M \sum_{j \geq 1} C_{j,M} n_j \end{bmatrix} \quad (2.24)$$

Применим к (2.23) явную разностную схему предиктор-корректор по времени:

$$\begin{cases} \frac{n^{k+\frac{1}{2}} - n^k}{0.5 \Delta t} = \mathbf{S}(n^k), \\ \frac{n^{k+1} - n^k}{\Delta t} = \mathbf{S}(n^{k+\frac{1}{2}}), \\ \mathbf{n}(0) = \mathbf{n}_0 \end{cases} \quad (2.25)$$

Выбранная схема имеет второй порядок точности по временной сетке. Ариф-

метическая сложность шага разностной схемы при данном подходе составит $O(M^2)$ операций. Далее составим алгоритм вычисления оператора (2.24) с более низкой алгоритмической сложностью.

Предположим, что функцию $C_{i,j}$ от переменных $i = \overline{1, M}$ и $j = \overline{1, M}$ можно приблизить скелетным разложением вида

$$C_{i,j} \approx \sum_{\alpha=1}^R U_{\alpha}(i)V_{\alpha}(j). \quad (2.26)$$

с матрицами U, V размеров $M \times R$. Разложение (2.26) будем строить с помощью крестового интерполяционного алгоритма [47]. Оно позволяет хранить $2MR$ значений элементов матриц U, V вместо исходных M^2 элементов C_{ij} , а его построение с помощью крестового алгоритма потребует $O(MR^3)$ арифметических операций.

Рассмотрим дискретную функцию

$$f_1(k) = \sum_{i+j=k} C_{i,j}n_i n_j \equiv \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i}n_i n_{k-i}, k = \overline{1, M}. \quad (2.27)$$

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

$$\begin{aligned} f_1(k) &= \sum_{i=1}^{k-1} C_{i,j}n_i n_{k-i} \approx \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R U_{\alpha}(i)V_{\alpha}(k-i)n_i n_{k-i} = \\ &= \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{\alpha=1}^R \widehat{U}_{\alpha}(i)\widehat{V}_{\alpha}(k-i) \quad (2.28) \\ \widehat{U}_{\alpha}(i) &\equiv U_{\alpha}(i)n_i; \quad \widehat{V}_{\alpha}(i) \equiv V_{\alpha}(i)n_i. \end{aligned}$$

В (2.28) имеем сумму из R линейных нижнетреугольных дискретных свёрток массивов $\widehat{U}_{\alpha}(i)$ и $\widehat{V}_{\alpha}(j)$, каждую из которых можно вычислить за $O(M \log M)$ арифметических операций одновременно при всех значениях $k = \overline{1, M}$ [71]. В результате, сложность вычисления первой суммы из системы (1.6) при $k = \overline{1, M}$ снизится с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций.

Далее рассмотрим дискретную функцию

$$f_2(k) = \sum_{i=1}^M C_{i,k} n_i, k = \overline{1, M}. \quad (2.29)$$

Вычисление значений $f_2(k)$ при $k = \overline{1, M}$ напрямую из (2.29) потребует $O(M^2)$ арифметических операций. Заметим, что операция (2.29) эквивалентна операции умножению матрицы \mathbf{C} на вектор значений n_i . Через разложение (2.26), вычисление (2.29) можно свести к поочерёднему умножению факторов разложения U, V^T на соответствующие векторы. Таким образом, сложность вычисления (2.29) снижается до $O(MR)$ операций.

Заметим, что вычисление кратной суммы из уравнения для мономеров можно свести к умножению факторов разложения симметричной матрицы значений $C_{i,j}$ на векторы:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{i=2}^M \sum_{j=2}^M C_{i,j} (i+j) n_i n_j &= \frac{1}{2} \sum_{i=2}^M i n_i \sum_{j=2}^M C_{i,j} n_j + \frac{1}{2} \sum_{i=2}^M n_i \sum_{j=2}^M C_{i,j} j n_j = \\ &= \begin{bmatrix} n_2 & n_3 & \dots & n_M \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} C_{2,2} & C_{2,3} & \dots & C_{2,M} \\ C_{3,2} & \dots & \dots & C_{3,M} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ C_{M,2} & C_{M,3} & \dots & C_{M,M} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 2n_2 \\ 3n_3 \\ \dots \\ Mn_M \end{bmatrix} \approx \\ &\approx \begin{bmatrix} n_2 & n_3 & \dots & n_M \end{bmatrix} \times UV^T \times \begin{bmatrix} 2n_2 \\ 3n_3 \\ \dots \\ Mn_M \end{bmatrix} \quad (2.30) \end{aligned}$$

Таким образом, сложность вычисления кратной суммы снижается с $O(M^2)$ до $O(MR)$ арифметических операций.

Используя построенные методы для вычисления (2.27), (2.29), (2.30) в схеме (2.25), получаем снижение сложности исходной разностной схемы с $O(M^2)$ до $O(RM \log M)$ арифметических операций, где R – число столбцов в факторах U, V разложения $\mathbf{C} \approx U V^T$. При $R \ll M$ построенный метод потребует существенно меньше арифметических операций для осуществления шага разностной схемы, а также меньше ячеек памяти, необходимых для хранения

значений $C_{i,j}$, чем исходный.

Параллельная реализация быстрого метода решения уравнений агрегации и фрагментации вещества в планетных кольцах

В данном разделе мы сформулируем параллельные алгоритмы быстрого вычисления значений функций (2.28), (2.29), а также значения кратной суммы (2.30). Для этого распределим элементы матриц скелетного разложения U, V по p процессорам в виде пар блоков U^k, V^k размеров $\frac{M}{p} \times R$, а вектор \mathbf{n} распределим по процессорам в виде блоков длины $\frac{M}{p}$. Строить скелетное разложение с введенным распределением блоков U^k, V^k будем с помощью параллельной реализации крестового алгоритма матричной интерполяции [51].

Вычисление значений (2.29) будем проводить в три этапа:

Алгоритм 1

1. Вычисляем по отдельности на каждом процессоре $\tilde{y}_i = V_i n_i, i = \overline{1, p}$.
2. С помощью операции коллективного обмена (редукция по сумме) распределяем на все процессоры вектор $\tilde{y} = \sum_{i=1}^p \tilde{y}_i$ размера R .
3. Вычисляем по отдельности на каждом процессоре итоговый блок $y_i = U_i \tilde{y}$ размера $\frac{M}{p}$.

Таким образом, имеем параллельный алгоритм быстрого вычисления значений функции $f_1(k)$.

Рассмотрим вспомогательную задачу вычисления значений функции

$$g(k) = \sum_{i=0}^k a_i b_{k-i}, k = \overline{0, M-1}. \quad (2.31)$$

Вычисление $g(k)$ равносильно задаче умножения треугольной теплицевой

матрицы

$$T(a) = \begin{bmatrix} a(v_0) & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a(v_1) & a(v_0) & 0 & 0 & 0 \\ a(v_2) & a(v_1) & a(v_0) & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & \dots & a(v_0) \end{bmatrix}$$

на вектор значений b . Заметим, что матрицу $T(a)$ можно представить в виде суммы обычного и косо́го циркулянтов:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \begin{bmatrix} a(v_0) & a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & a(v_1) \\ a(v_1) & a(v_0) & a(v_N) & \dots & a(v_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & \dots & a(v_0) \end{bmatrix} \\ + \frac{1}{2} & \begin{bmatrix} a(v_0) & -a(v_N) & -a(v_{N-1}) & \dots & -a(v_1) \\ a(v_1) & a(v_0) & -a(v_N) & \dots & -a(v_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a(v_N) & a(v_{N-1}) & \dots & \dots & a(v_0) \end{bmatrix} \\ & = \frac{1}{2}(C^+ + C^-) = T(a). \end{aligned} \tag{2.32}$$

Следовательно, $T(a)b = \frac{1}{2}(C^+b + C^-b)$. Быстрое умножение каждого из циркулянтов на вектор основывается на использовании быстрого дискретного преобразования Фурье (параллельная версия алгоритма быстрого преобразования Фурье реализована, например, в библиотеке *Intel MKL*), которое при используемом распределении векторов по процессорам можно выполнить параллельно. Далее, пользуясь (2.28), снова сводим вычисление (2.27) к R вычислениям функций вида $g(k)$ и вычислению суммы их значений. Отсюда имеем параллельный алгоритм вычислений функции $g(k)$:

Алгоритм 2

- Вычисляем параллельно R векторов-свёрток с помощью известных параллельных алгоритмов умножения треугольной теплицевой матрицы на вектор.

- Складываем на каждом процессоре R блоков-результатов умножения.

Параллельное вычисление кратной суммы 2.30 проводится в два этапа: параллельно вычисляем произведение скелетного разложения матрицы \mathbf{C} на вектор \mathbf{n} (см. алгоритм 1), далее вычисляем параллельно скалярное произведение векторов

$$\begin{bmatrix} n_1 & 2n_2 & \dots & Mn_M \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} f_1 & f_2 & \dots & f_M \end{bmatrix}^T,$$

где $\mathbf{f} \equiv \mathbf{C} \mathbf{n}$.

Таким образом, построены параллельные алгоритмы для вычисления всех составляющих оператора \mathbf{S} . Шаги используемой явной разностной схемы предиктор-корректор будем также осуществлять параллельно, работая по отдельности на каждом процессоре с вектор-блоками размеров $\frac{M}{p}$. Следовательно, предложен параллельный вариант быстрого алгоритма решения кинетических систем уравнений агрегации и фрагментации. Отметим, что приведённая схема легко адаптируется ко всем рассматриваемым однокомпонентным моделям процессов агрегации и дробления вещества. Тестирование приведённых параллельных алгоритмов проведено с использованием кластера ИВМ РАН, а также суперкомпьютера “Ломоносов”, результаты тестирования алгоритма приводятся ниже в главе, посвященной результатам численных экспериментов с использованием сформулированных алгоритмов.

Быстрый метод решения системы уравнений агрегации и фрагментации в профиле почвы

В данном разделе мы сформулируем быстрый разностный метод решений уравнений агрегации и фрагментации в профиле почвы

$$\begin{aligned} \frac{dn_i}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} C_{i-j,j} n_{i-j} n_j - n_i \sum_{j=1}^{N-i} C_{i,j} n_j - \\ & - F_i n_i + \sum_{k=i+1}^N F_k n_k \frac{k}{i(k-1)}, i = 1, 2, \dots, N. \end{aligned}$$

Воспользуемся снова схемой предиктор-корректор для интегрирования системы дифференциальных уравнений по времени, где оператор \mathbf{S} определяется записью правой части математической модели. Применение схемы напрямую без эффективных методов вычисления сумм агрегации и дробления вещества повлечёт за собой необходимость использования $O(N^2)$ арифметических операций, что является неприемлемой алгоритмической сложностью. Для ускорения шагов разностной схемы по времени воспользуемся уже сформированной методологией с дополнительными изменениями, о которых пойдёт речь ниже.

Быстрые методы вычисления сумм вида

$$c_i = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} C_{i-j,j} n_{i-j} n_j,$$

уже сформулированы выше в разделе, содержащем описание быстрой методологии решения уравнений агрегации и дробления вещества в планетных кольцах Сатурна. Отметим также, что вычисление членов спонтанного дробления

$$f_i = F_i n_i$$

для всех значений $i = 1, N$ потребует $O(N)$ арифметических операций. Следовательно, осталось лишь предложить быстрые методы вычисления всех элементов следующего вектора

$$h_i = \sum_{k=i+1}^N F_k n_k \frac{k}{i(k-1)},$$

и вектора

$$p_i = n_i \sum_{j=1}^{N-i} C_{i,j} n_j.$$

Операция вычисления элементов вектора h_i эквивалентна следующей опе-

рации умножения верхнетреугольной матрицы на вектор

$$\begin{bmatrix} h_1 \\ h_2 \\ h_3 \\ \dots \\ h_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & F_2 \frac{2}{1} & F_3 \frac{3}{2} & \dots & F_N \frac{N}{N-1} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} F_3 \frac{3}{2} & \dots & \frac{1}{2} F_N \frac{N}{N-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{N-1} F_N \frac{N}{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \dots \\ n_N \end{bmatrix}.$$

Заметим, что сформированная верхнетреугольная матрица является подматрицей плотной матрицы \widehat{F} с элементами

$$\widehat{F}_{i,j} = \frac{1}{i} F_j \frac{j}{j-1}, \quad j = 2, 3, \dots, N-1,$$

$$\widehat{F}_{i,1} = \widehat{F}_{N,i} \equiv 1.$$

В свою очередь матрица \widehat{F} является матрицей ранга 1. Следовательно, вычисление элементов вектора h мы свели к умножению треугольной подматрицы одноранговой матрицы на вектор. Данная операция может быть произведена за $O(N)$ умножений (см., например, [72]).

Аналогичным образом к умножению треугольной подматрицы матрицы малого ранга на вектор сводится и вычисление элементов вектора p_i за $O(NR)$ операций умножения, где R – ранг функции ядра коагуляции $C_{i,j}$. Таким образом, имеем сложность вычисления правой части равную $O(NR \log N)$ арифметических операций, что существенно снижает сложность временных шагов схемы предиктор-корректор. Результаты математического моделирования с использованием сформулированной методологии будут представлены ниже в главе, посвященной результатам численных экспериментов.

2.2.3 Итерационный метод решения уравнений агрегации и фрагментации в стационарной форме

Сформулируем простейший итерационный метод решения уравнений моделей процессов агрегации и фрагментации в стационарной форме. В предложенных кратких обозначениях задача решения уравнений рассматриваемых

моделей в стационарной форме будет иметь следующий вид

$$\mathbf{S}(n) = 0, \quad (2.33)$$

где через \mathbf{S} мы обозначили операторную запись правой части уравнений модели. Важно отметить, что здесь дополнительным условием является требование нахождения решения с ненулевой полной массой

$$\sum_{k=1}^{\infty} n_k = \tilde{M}.$$

Из вида системы уравнений моделей агрегации и фрагментации в планетных кольцах или агрегации и дроблений вещества в почвенном профиле очевидно, что при игнорировании дополнительного условия у системы появится тривиальное нулевое решение, бессмысленное с точки зрения реальных физических процессов.

Сведём систему нелинейных уравнений агрегации и фрагментации к задаче о неподвижной точке

$$\mathbf{G}(\mathbf{n}) \equiv \mathbf{S}(n) + n = n,$$

и применим метод простой итерации (см., например, в [45]), проигнорировав условия поиска решения с заданной массой,

$$G(n^i) \equiv \mathbf{S}(n^i) + n^i = n^{i+1}.$$

Если оператор $\mathbf{S}(n^i)$ вычислять при помощи сформулированных быстрых методов, алгоритмическая сложность каждого этапа итерационной схемы составит лишь $O(MR \log M)$ арифметических операций. Для инициализации приведённого итерационного процесса достаточно взять любой вектор с неотрицательными элементами n^0 с требуемой искомой массой

$$\sum_{k=1}^M kn_k^0 = \tilde{M}.$$

Так как рассматриваемые модели процессов агрегации и фрагментации ве-

щества являются консервативными (сохраняющими полную массу решения), предлагаемый итерационный метод автоматически будет строить решения с полной массой, равной полной массе начального приближения (так как метод вычисления оператора \mathbf{S} , описанный выше, позволяет полностью вычислять члены, отвечающие за слияния и дробление частиц). Критерием останковки в данном случае выберем евклидову норму невязки

$$\|S(n^i) - n^i\|_2 = \|n^{i+1} - n^i\|_2 < \varepsilon,$$

которая в данном случае равна норме сдвига очередного приближения относительно предыдущего.

Ускорить сходимость метода простой итерации можно при помощи метода Андерсона, предложенного в 1965 году [73]. Алгоритм базируется на простой идее расширения количество используемых векторов последовательности x_k при вычислении нового приближения решения x_{k+1} , поэтому в каком-то смысле метод Андерсона ассоциируется с использованием пространств Крылова [74]. Более подробный анализ связей метода Андерсона с алгоритмами решения нелинейных систем уравнений можно найти, например, в работах [75, 76]. Так, в работе [76] доказаны гарантии сходимости метода ускорения Андерсона в случае сходимости метода простой итерации и на примере линейных задач [76] доказана эквивалентность метода Андерсона обобщённому методу минимальных невязок с рестартами, а в работе [75] для линейного случая показана эквивалентность метода Андерсона специальной реализации метода секущих с обновлением результатов по методу Бройдена. Новое приближение x_{k+1} в методе Андерсона ищется в виде аффинной комбинации точек $G(n^k), G(n^{k-1}), \dots, G(n^{k-m})$, коэффициенты которой должны минимизировать длину соответствующей аффинной комбинации векторов невязок. Непосредственное описание алгоритма ускорения Андерсона представлено в алгоритме 1 .

Из описания алгоритма видно, что важным параметром метода является неотрицательное целое число m – максимальное количество векторов последовательности n^k , на основе линейной комбинации которых строится очередное линейное приближение. Формальную задачу о наименьших квадратах из строки **6** описания алгоритма можно решить точно за небольшое коли-

Algorithm 1 Метод ускорения Андерсона

```
1: procedure ANDERSON( $x_0$ ,  $G$ ,  $M$ )
2:    $x_1 = G(x_0)$   $F_0 = G(x_0) - x_0$ 
3:   for  $k = 1 \dots$  do
4:      $m_k = \min(m, k)$ 
5:      $F_k = G(x_k) - x_k$ 
6:     Минимизировать  $\| \sum_{j=0}^{m_k} \alpha_j^k F_{k-m_k+j} \|_2$  при условии
7:        $\sum_{j=0}^{m_k} \alpha_j^k = 1$ 
8:      $x_{k+1} = \sum_{j=0}^{m_k} \alpha_j^k G(x_{k-m_k+j})$ 
9:   endfor
10: end procedure
```

чество арифметических операций при помощи QR -разложения. Однако, для решения задачи оптимизации из строки **6** требуется предварительное преобразование задачи от задачи условной оптимизации с условиями из строки **7** алгоритма к классической безусловной задаче о наименьших квадратах для переопределённой линейной системы. Подробности организации данного преобразования изложены, например, в работе [76].

Метод Андерсона зарекомендовал себя в качестве надёжного вычислительного инструмента в самых разных прикладных областях, так, например, в вычислительной химии данный метод связан с именем Питера Пюлая [77,78] и известен под названием DIIS (Direct Inversion of Iterative Subspace) и используется для ускорения и стабилизации сходимости метода Хартри-Фока, а также в вычислительных пакетах, основанных на использовании теории функционала плотности ². В задачах вычислительной физики метод применялся для ускорения сходимости нелинейной схемы конечных объёмов при решении уравнений адвекции-диффузии [79]. Метод Андерсона также активно используется в математической статистике, например, для ускорения вычислительного алгоритма по максимизации функции правдоподобия [80]. В данной работе мы продемонстрируем применимость метода Андерсона для ускорения сходимости метода простой итерации при поиске стационарных решений математической модели процесса необратимой коагуляции с источником мономеров.

²например, в пакете VASP (Vienna Ab initio Simulation Package)

Очевидно, что предлагаемый подход к решению уравнений моделей агрегации и фрагментации в стационарной форме является простейшим и может быть многократно улучшен, так как:

- мы не рассмотрели возможности использования релаксационного оператора Γ при сведении исходной системы к задаче о неподвижной точке,

$$\mathbf{G}(\mathbf{n}^i) \equiv \Gamma \mathbf{S}(\mathbf{n}^i) + \mathbf{n}^i = \mathbf{n}^{i+1};$$

например, выбирая Γ равным минус обратной матрице Якоби, можно получить метод Ньютона

$$\mathbf{G}(\mathbf{n}^i) \equiv \mathbf{n}^i - J^{-1}(\mathbf{n}^i) \mathbf{S}(\mathbf{n}^i) = \mathbf{n}^{i+1}$$

или использовать различные многомерные обобщения метода секущих [75] вместо схемы ускорения Андерсона;

- существуют другие критерии остановки итерационного процесса, возможно, более эффективные для рассматриваемого класса задач

Несмотря на перечисленные замечания, приведённый подход позволяет решать за приемлемые времена крупные системы уравнений агрегации и фрагментации в стационарной форме с числом уравнений вплоть до 2^{20} при норме невязки 10^{-12} . Результаты по тестированию сформулированного подхода мы приводим ниже в главе, посвященной результатам численных экспериментов. Далее мы приводим некоторые простейшие теоретические соображения о причинах улучшения сходимости метода простой итерации при помощи схемы ускорения Андерсона. Более подробные исследования свойств сходимости метода Андерсона можно найти в работах [76, 81, 82].

2.3 Применение ТТ-разложений для ускорения конечно-разностной схемы решения уравнения многокомпонентной коагуляции

2.3.1 Метод с использованием вложенного вызова ТТ-крестового метода

В этом разделе мы опишем численный метод решения многокомпонентного уравнения коагуляции Смолуховского, основанный на “вложенном” применении ТТ-крестового метода для ускорения шагов разностной схемы предиктор-корректор.

При численном решении многокомпонентного уравнения Смолуховского вычисление элементов массива для следующего шага разностной схемы можно интерпретировать, как вычисление значений некоторой сеточной функции на основе значений другой сеточной функции. Будем искать аппроксимацию заданной точности для искомой функции, чтобы не проводить вычислений её значений в каждом из узлов сетки. Одним из методов приближения многомерных массивов является ТТ-крестовая аппроксимация [48].

При записи схемы предиктор-корректор решения многокомпонентного уравнения Смолуховского в следующем виде

$$\begin{aligned}n^{k+\frac{1}{2}} &= \left(\frac{1}{2}L_1(n^k) - n^k \cdot L_2(n^k) \right) \frac{\tau}{2} + n^k \\n^{k+1} &= \left(\frac{1}{2}L_1(n^{k+\frac{1}{2}}) - n^k \cdot L_2(n^{k+\frac{1}{2}}) \right) \tau + n^k,\end{aligned}$$

имеем явные выражения многомерных сеточных функций $n^{k+\frac{1}{2}}, n^{k+1}$. Построение их приближенного разложения в ТТ-формате при помощи ТТ-крестового метода [48] потребует $O(dNR^3)$ вычислений их значений в узлах (операция вычисления значений, вообще говоря, может быть весьма затратной).

В качестве операторов L_1, L_2 будем в ТТ-формате хранить веса квадратурной формулы трапеций (такое разложение легко построить аналитически, оно имеет ТТ-ранги $R = 1$) и вычислять с ними скалярное произведение аппроксимаций в ТТ-формате заданной точности для подынтегральных выра-

жений от сеточных функций

$$C(\bar{v} - \bar{u}; \bar{u})n^k(\bar{v} - \bar{u})n^k(\bar{u})$$

и

$$C(\bar{v}; \bar{u})n^k(\bar{u})$$

соответственно. Построение приближений потребует дополнительно $O(dNR^3)$ арифметических вычислений их значений (которые, в свою очередь тоже требуют $O(dR^2)$ операций, так как $n^k(\bar{u})$ хранится в виде ТТ-разложения), а вычисление скалярных произведений с весами формулы трапеций, представленными в ТТ-формате $O(dNR^2)$ операций.

Следовательно стоимость вычисления одного значения для сеточных функций $n^{k+\frac{1}{2}}, n^{k+1}$ составит $O(dNR^3)$ операций. При этом для получения их приближений в ТТ-формате требуется $O(dNR^3)$ вычислений значений, следовательно полная сложность составит

$$O(dNR^3 \cdot dNR^3 \cdot dR^2) = O(d^3 N^2 R^8)$$

арифметических операций вместо исходных $O(N^{2d})$, а также позволит использовать лишь $O(dNR^2)$ ячеек памяти вместо исходных $O(N^d)$. При $R \ll N$ предлагаемая схема будет гораздо более эффективной в сравнении с исходным численным методом. Подробности алгоритмической реализации приведены в алгоритмах 2, 3, 4.

Отметим, что несмотря на теоретическую привлекательность и простоту предложенной методологии, множитель $d^2 R^8$ в асимптотике, квадратичный рост сложности с числом узлов N , а также невозможность адаптации сформулированных идей к однокомпонентным задачам, делают её малопривлекательной и неконкурентноспособной в сравнении с методами Монте Карло.

В следующем разделе мы приводим развитие идей использования приближенных разложений используемых многомерных массивов в ТТ-формате для ускорения шагов разностной схемы предиктор корректор, позволяющие снизить алгоритмическую сложность шагов разностной схемы до $O(dN \log NR^2 + dNR^4)$ арифметических операций. Метод, описываемый в следующей главе позволяет получать решения многокомпонентного уравнения Смолуховского

Algorithm 2 Один шаг схемы интегрирования по времени

1: **procedure** ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ВРЕМЕНИ($C(\bar{u}, \bar{v}), n^k(\bar{v}), \tau$)

2: Вызов ТТ-крестового метода для вычисления элементов сеточной функции

$$n^{k+\frac{1}{2}} = \left(\frac{1}{2}L_1(n^k) - n^k L_2(n^k) \right) \frac{\tau}{2} + n^k$$

потребуется $O(dNR^3)$ вычислений значений в узлах сетки.

3: Вызов ТТ-крестового метода для вычисления элементов сеточной функции

$$n^{k+1} = \left(\frac{1}{2}L_1(n^{k+\frac{1}{2}}) - n^k L_2(n^{k+\frac{1}{2}}) \right) \tau + n^k$$

потребуется $O(dNR^3)$ вычислений значений в узлах сетки

4: **end procedure**

5:

Algorithm 3 Вычисление L_1 в точке

1: **procedure** ВЫЧИСЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ $L_1(n^k)$ В ТОЧКЕ $(v_1, v_2, \dots, v_d)(n^k$
– в ТТ формате, $C(\bar{u}, \bar{v})$ – функция значения ядра коагуляции в точке)

2: Сместить границы разложения сеточной функции в точку $\bar{v} = (v_1, v_2, \dots, v_d)$ (выделить “параллелепипед”) из точки $(v_{1\max}, v_{2\max}, \dots, v_{d\max})$

3: Построить ТТ-разложение для d -мерного подынтегрального выражения по переменным \bar{u} при зафиксированной многомерной точке \bar{v}

$$n^k(\bar{u}) \cdot n^k(\bar{v} - \bar{u}) \cdot C(\bar{v} - \bar{u}, \bar{v})$$

за $O(dNR^3)$ вычислений значений со сложностью $O(dR^2)$ действий, следовательно, сложность построения составит $O(d^2NR^5)$ операций.

4: Для выделенного “параллелепипеда” построить веса квадратурной формулы $O(dN)$ действий в ТТ-формате

5: Вычислить скалярное произведение ТТ-разложения

$$n^k(\bar{u}) \cdot n^k(\bar{v} - \bar{u}) \cdot C(\bar{v} - \bar{u}, \bar{v})$$

с весами квадратурной формулы за $O(dNR^2)$ операций

6: **Полная сложность составит** $O(d^2NR^5)$

7: **end procedure**

Algorithm 4 Вычисление $n^k \cdot L_2$ в точке

- 1: **procedure** ВЫЧИСЛЕНИЕ ЗНАЧЕНИЯ $n^k \cdot L_2(n^k)$ В ТОЧКЕ (v_1, v_2, \dots, v_d) (n^k – в ТТ формате, $C(\bar{u}, \bar{v})$ – функция значения ядра коагуляции в точке)
- 2: Сместить границы разложения сеточной функции в точку $\bar{v} = (v_1, v_2, \dots, v_d)$ (выделить “параллелепипед”) из точки $(v_{1\max}, v_{2\max}, \dots, v_{d\max})$
- 3: Построить ТТ-разложение для d -мерного подынтегрального выражения по переменным \bar{u} при зафиксированной многомерной точке \bar{v}

$$n^k(\bar{u}) \cdot C(\bar{u}, \bar{v}) \cdot n^k(\bar{v})$$

за $O(dNR^3)$ вычислений значений со сложностью $O(dR^2)$ действий, следовательно, сложность построения составит $O(d^2NR^5)$ операций.

- 4: Для выделенного “параллелепипеда” построить веса квадратурной формулы $O(dN)$ действий в ТТ-формате
- 5: Вычислить скалярное произведение ТТ-разложения

$$n^k(\bar{u}) \cdot C(\bar{u}, \bar{v}) \cdot n^k(\bar{v})$$

с весами квадратурной формулы за $O(dNR^2)$ операций

- 6: **Полная сложность составит** $O(d^2NR^5)$
 - 7: **end procedure**
-

с точностью в сотни раз превышающей точность методов Монте Карло за сопоставимые расчётные времена.

2.3.2 Быстрый метод решения уравнения многокомпонентной коагуляции

В данном разделе мы развиваем реализацию быстрого метода, основанного на применении приближенных разложений многомерных массивов в ТТ-формате. В следующих подразделах будут предложены быстрые алгоритмы вычисления интегральных операторов, входящих в правую часть многокомпонентного уравнения Смолуховского. Эти быстрые алгоритмы основаны на использовании малоранговых тензорных представлений в ТТ-формате подынтегральных функций и использовании эффективных реализаций тензорной арифметики. В результате использования предложенных быстрых алгоритмов мы ускорим шаги разностной схемы предиктор-корректор. В результате, сложность численного метода снизится с $O(N^{2d})$ арифметических операций до всего лишь $O(d^2 R^4 N \log N)$, где R – максимальный из ТТ-рангов используемых ТТ-разложений массивов, d – число коагулирующих компонент в уравнении Смолуховского, а N – число узлов по каждому из направлений объёмной сетки.

Так как эффективность предлагаемых подходов существенно зависит от значений R , в следующей главе мы сформулируем оценки ТТ-рангов некоторых видов ядер коагуляции, часто используемых в приложениях, а также одного семейства известных аналитических решений задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского.

Быстрое вычисление интегральных операторов в ТТ-формате 1

Предположим, что функции $f(\bar{u}) = f(u_1, \dots, u_d)$ и $g(\bar{u}) = g(u_1, \dots, u_d)$ заданы на замкнутом параллелепипеде $[0; V_{\max}]^d$, покрытом равномерной сеткой с шагом h по каждому из направлений v_i с N узлами, и необходимо вычислить следующую функцию

$$q(v_1, \dots, v_d) = \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} f(v_1 - u_1, \dots, v_d - u_d) g(u_1, \dots, u_d) du_1 \dots du_d. \quad (2.34)$$

Ключевым понятием в данном случае является “вычисление функции”. Если необходимо вычислить её значения во всех N^d узлах сетки, то задача становится алгоритмически невыполнимой. Ясно, что прямое применение любой квадратурной формулы для вычисления интегрального оператора вида (2.34), например, квадратуры трапеций, ведёт к алгоритмической сложности $O(N^{2d})$ операций.

Интегральный оператор вида (2.34) – это так называемая нижнетреугольная свёртка. Если функции $f(\bar{u}), g(\bar{u})$ уже представлены в виде ТТ-формата, быстрый алгоритм вычисления дискретной свёртки уже представлен в работе [71]. Подчеркнём, что на входе и выходе этого алгоритма мы имеем некоторые ТТ-разложения сеточных функций, которые никогда не приходится вычислять во всех узлах сетки. В рамках нашей работы мы отталкиваемся от уже известных идей работы [71], но адаптируем эту технику для непрерывного случая с применением квадратурной формулы трапеций. Предположим, что функции $f(\bar{u}), g(\bar{u})$ уже заданы в виде ТТ-формата с максимальными ТТ-рангами, не превышающими R . Перепишем далее (2.34) в следующем виде:

$$\begin{aligned} q(v_1, \dots, v_d) &= \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} f(v_1 - u_1, \dots, v_d - u_d) g(u_1, \dots, u_d) du_1 \dots du_d \\ &= \sum_{\alpha_0, \dots, \alpha_d} \sum_{\beta_0, \dots, \beta_d} \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} f_1(\alpha_0, v_1 - u_1, \alpha_1) \dots f_d(\alpha_{d-1}, v_d - u_d, \alpha_d) g_1(\beta_1, u_1, \beta_2) \dots g_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_1 \dots du_d \\ &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_d} \sum_{\beta_0, \dots, \beta_d} \int_0^{v_1} f_1(\alpha_0, v_1 - u_1, \alpha_1) g_1(\beta_1, u_1, \beta_2) du_1 \dots \int_0^{v_d} f_d(\alpha_{d-1}, v_d - u_d, \alpha_d) \dots g_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d. \end{aligned}$$

Конечная формула

$$\begin{aligned} q(\bar{v}) &= \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_d} \sum_{\beta_0, \dots, \beta_d} \int_0^{v_1} f_1(\alpha_0, v_1 - u_1, \alpha_1) g_1(\beta_1, u_1, \beta_2) du_1 \times \\ &\quad \times \dots \times \\ &\quad \times \int_0^{v_d} f_d(\alpha_{d-1}, v_d - u_d, \alpha_d) \dots g_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d \end{aligned} \tag{2.35}$$

состоит из $O(dR^2)$ одномерных нижнетреугольных свёрток

$$q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k) = \int_0^{v_k} f_k(\alpha_{k-1}, v_k - u_k, \alpha_k) g_d(\beta_{k-1}, u_k, \beta_k) du_k,$$

где $\gamma_k = \overline{\alpha_k \beta_k}$ – это мультииндекс из $O(R^2)$ значений (конкатенация массивов вдоль направлений α_k, β_k). Каждая из этих свёрток может быть вычислена с помощью квадратуры трапеций через сведение её к операции вычисления

умножений нижнетреугольной теплицевой матрицы на вектор:

$$h \begin{bmatrix} \frac{1}{2}f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k) & 0 & 0 & 0 \\ f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_1}, \alpha_k) & \frac{1}{2}f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k) & 0 & 0 \\ f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_2}, \alpha_k) & f(\alpha_{k-1}, v_1, \alpha_k) & \frac{1}{2}f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k) & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_N}, \alpha_k) & f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_{N-1}}, \alpha_k) & \dots & \frac{1}{2}f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \frac{1}{2}g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k) \\ g_k(\beta_{k-1}, v_{k_1}, \beta_k) \\ g_k(\beta_{k-1}, v_{k_2}, \beta_k) \\ \dots \\ g_k(\beta_{k-1}, v_{k_N}, \beta_k) \end{bmatrix}.$$

Эту операцию умножения можно выполнить, пользуясь стандартной методикой, основанной на использовании алгоритма быстрого дискретного преобразования Фурье. (см., например [71] или [23]) за $O(N \log N)$ арифметических операций. Из (2.35) видно, что функция $q(\bar{v})$ уже представлена в виде ТТ-формата с рангами, равными произведению рангов функций $f(\bar{v})$ и $g(\bar{v})$. Следовательно, если максимальный из рангов ядер ТТ-разложений функций $f(\bar{v})$ и $g(\bar{v})$ равен R , то максимальный ТТ-ранг функции $q(\bar{v})$ будет $O(R^2)$.

В итоге, имеем ТТ-разложение функции $q(\bar{v})$ за $O(dR^2N \log N + dNR^4)$ арифметических операций (см. алгоритм 5). Множитель $\frac{1}{2}$ в строках 4 и 6 псевдокода критически важен для представленного алгоритма, так как позволяет получить квадратуру трапеций и достичь второго порядка точности вычисления значений функции $q(\bar{v})$.

Если мы хотим вычислить функцию $q(\bar{v})$, используя алгоритм 5 только один раз, квадратичный рост ТТ-рангов не является большой проблемой, но существенно снижает эффективность используемой методологии, если необходимо вычислять и комбинировать интегральные операторы этого вида много раз. В качестве решения данной проблемы, мы модифицируем предложенный “наивный” полход в алгоритм 6.

Единственное отличие между алгоритмами 5 и 6 состоит в способе вычисления $\tilde{q}(\bar{v})$. В алгоритме 5, мы вычисляем поэлементные произведения пар тензорных поездов $\tilde{f}(\bar{v})$ и $\tilde{g}(\bar{v})$ вдоль физических мод v_k напрямую, используя ТТ-арифметику. В то же время, в алгоритме 6 мы строим данные поэлементные произведения в приближенном виде, используя ТТ-крестовый интерполяционный алгоритм [48].

Сложность алгоритма 6 составит $O(dR^2N \log N + d^2NR^5)$ операций. Формально, это несколько хуже сложности алгоритма 5, которая составляет $O(dR^2N \log N + dNR^4)$. Однако на практике³, использование ТТ-крестового

³впрочем, без каких-либо строгих гарантий

Algorithm 5 Билинейная свертка в ТТ-формате

1: **procedure** СВЕРТКА В ТТ-ФОРМАТЕ($f(\bar{v}), g(\bar{v})$)
2: Построить ТТ-разложения для $f(\bar{v}), g(\bar{v})$ с максимальным из ТТ-рангов равным R
3: **for** $k = 1 \dots d$ **do**
4: $f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k) := \frac{1}{2} f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k)$
5: Расширить факторы разложения $f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k)$ на $N - 1$ нулей вдоль направлений v_k
6: $g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k) := \frac{1}{2} g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k)$
7: Расширить факторы разложения $g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k)$ на $N - 1$ нулей вдоль направлений v_k
8: $\tilde{f}_k(\alpha_{k-1}, v_k, \alpha_k) := \text{FFT}(f_k(\alpha_{k-1}, v_k, \alpha_k))$, $O(R^2)$ одномерных быстрых преобразований Фурье вдоль направлений v_k со сложностью $O(N \log N)$ каждое
9: $\tilde{g}_k(\beta_{k-1}, v_k, \beta_k) := \text{FFT}(g_k(\beta_{k-1}, v_k, \beta_k))$, $O(R^2)$ одномерных быстрых преобразований Фурье вдоль направлений v_k со сложностью $O(N \log N)$ каждое
10: **end for**
11: $\tilde{q}(\bar{v}) := \tilde{f}(\bar{v}) \cdot \tilde{g}(\bar{v})$ – прямое поэлементное произведение из ТТ-арифметики вдоль направлений v_k за $O(dR^4)$ операций. ТТ-ранги \tilde{q} возрастут до $O(R^2)$, потребуется $O(dNR^4)$ действий.
12: **for** $k = 1 \dots d$ **do**
13: $q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k) := h \cdot \text{IFFT}(\tilde{q}_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k))$, $O(R^2)$ обратных одномерных быстрых преобразований Фурье вдоль направлений v_k со сложностью $O(N \log N)$ каждое
14: Выбросить $N - 1$ последних элементов из факторов разложения $q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k)$ вдоль направлений v_k
15: $q_k(\gamma_{k-1}, v_{k_0}, \gamma_k) := 0$
16: **end for**
17: **return** разложение $q(\bar{v})$ в ТТ-формат с факторам $q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k)$
18: **Полная сложность составит** $O(dR^2N \log N + dNR^4)$
19: **end procedure**

Algorithm 6 Билинейная свертка в ТТ-формате

- 1: **procedure** СВЕРТКА В ТТ-ФОРМАТЕ($f(\bar{v}), g(\bar{v})$)
 - 2: Построить ТТ-разложения для $f(\bar{v}), g(\bar{v})$ с максимальным из ТТ-рангов равным R
 - 3: **for** $k = 1 \dots d$ **do**
 - 4: $f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k) := \frac{1}{2} f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k)$
 - 5: Расширить факторы разложения $f_k(\alpha_{k-1}, v_{k_0}, \alpha_k)$ на $N - 1$ нулей вдоль направлений v_k
 - 6: $g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k) := \frac{1}{2} g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k)$
 - 7: Расширить факторы разложения $g_k(\beta_{k-1}, v_{k_0}, \beta_k)$ на $N - 1$ нулей вдоль направлений v_k
 - 8: $\tilde{f}_k(\alpha_{k-1}, v_k, \alpha_k) := \text{FFT}(f_k(\alpha_{k-1}, v_k, \alpha_k)), O(R^2)$ одномерных быстрых преобразований Фурье вдоль направлений v_k со сложностью $O(N \log N)$ каждое
 - 9: $\tilde{g}_k(\beta_{k-1}, v_k, \beta_k) := \text{FFT}(g_k(\beta_{k-1}, v_k, \beta_k)), O(R^2)$ одномерных быстрых преобразований Фурье вдоль направлений v_k со сложностью $O(N \log N)$ каждое
 - 10: **end for**
 - 11: $\tilde{q}(\bar{v}) := \text{TT-CROSS APPROXIMATION}(\tilde{f}(\bar{v}) \cdot \tilde{g}(\bar{v})) - O(dNR^3)$ вычислений значений со сложностью $O(dR^2)$ каждое, итого $O(d^2NR^5)$ операций
 - 12: **for** $k = 1 \dots d$ **do**
 - 13: $q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k) := h \cdot \text{IFFT}(\tilde{q}_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k)), O(R^2)$ обратных одномерных быстрых преобразований Фурье вдоль направлений v_k со сложностью $O(N \log N)$ каждое
 - 14: Выбросить $N - 1$ последних элементов из факторов разложения $q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k)$ вдоль направлений v_k
 - 15: $q_k(\gamma_{k-1}, v_{k_0}, \gamma_k) := 0$
 - 16: **end for**
 - 17: **return** разложение $q(\bar{v})$ в ТТ-формат с факторам $q_k(\gamma_{k-1}, v_k, \gamma_k)$
 - 18: **Полная сложность составит** $O(dR^2N \log N + d^2NR^5)$
 - 19: **end procedure**
-

интерполяционного алгоритма часто приводит к более низким ГТ-рангам используемых функций и существенно повышает эффективность модифицированной методологии, что невозможно наблюдать в приведённой формальной оценке вычислительной сложности, хотя использование ГТ-крестового метода одновременно вносит дополнительную погрешность в элементы функции $q(\bar{v})$.

В любом случае, оба приведённых алгоритма позволяют снизить сложность применения квадратуры трапеция для вычисления интегрального оператора (2.34) с $O(N^{2d})$ до хотя бы $O(dR^2N \log N + d^2NR^5)$ арифметических операций и позволяют нам использовать эту технику для вычисления многомерных интегральных операторов.

Быстрое вычисление интегральных операторов в ГТ-формате 2

В этом разделе мы предлагаем быстрый алгоритм вычислений интегральных операторов вида

$$q(\bar{v}) = \int_0^{V_{\max}} \dots \int_0^{V_{\max}} C(\bar{v}; \bar{u}) f(\bar{u}) du_1 \dots du_d \quad (2.36)$$

на том же замкнутом параллелепипеде $[0; V_{\max}]^d$, покрытом такой же многомерной равномерной сеткой с шагов h и N узлами по каждому из направлений.

Предположим, что функции $C(\bar{v}; \bar{u})$ и $f(\bar{u})$ уже представлены в виде ГТ-формата. Для факторов разложения $C(\bar{v}; \bar{u})$ будем использовать следующие обозначения

$$\begin{aligned} C(\bar{v}; \bar{u}) &:= \sum_{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_d, \alpha_{d+1}, \dots, \alpha_{2d}} C_1(\alpha_0, v_1, \alpha_1) \dots C_{2d}(\alpha_{2d-1}, v_d, \alpha_{2d}) := \\ &= \sum_{\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_d, \alpha_{d+1}, \dots, \alpha_{2d}} C_1^v(\alpha_0, v_1, \alpha_1) \dots C_d^v(\alpha_{d-1}, v_d, \alpha_d) \times \\ &\quad \times C_1^u(\alpha_d, u_1, \alpha_{d+1}) \dots C_d^u(\alpha_{2d-1}, u_1, \alpha_{2d}). \end{aligned}$$

Тогда мы можем легко переписать (2.36) в следующей форме

$$\begin{aligned}
q(\bar{v}) &= \int_0^{V_{\max}} \dots \int_0^{V_{\max}} C(\bar{v}; \bar{u}) f(\bar{u}) du_1 \dots du_d = \sum_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}} C_1^v(\alpha_0, v_1, \alpha_1) \dots C_d^v(\alpha_{d-1}, v_d, \alpha_d) \times \\
&\times \int_0^{V_{\max}} C_1^u(\alpha_d, u_1, \alpha_{d+1}) f_1(\beta_0, u_1, \beta_1) du_1 \dots \int_0^{V_{\max}} C_d^u(\alpha_{2d-1}, u_d, \alpha_{2d}) f_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d = \\
&= \sum_{\bar{\alpha}} C_1^v(\alpha_0, v_1, \alpha_1) \dots C_d^v(\alpha_{d-1}, v_d, \alpha_d) \sum_{\bar{\beta}} \int_0^{V_{\max}} C_1^u(\alpha_d, u_1, \alpha_{d+1}) f_1(\beta_0, u_1, \beta_1) du_1 \times \\
&\dots \times \int_0^{V_{\max}} C_d^u(\alpha_{2d-1}, u_d, \alpha_{2d}) f_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d = \sum_{\alpha_d=1}^{R_d} \widetilde{C}_{\alpha_d}^v(\bar{v}) I_{\alpha_d},
\end{aligned}$$

где $\widetilde{C}_{\alpha_d}^v$ – набор из R_d тензорных поездов следующего вида

$$\widetilde{C}_{\alpha_d}^v(v_1, \dots, v_d) = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{d-1}} C_1^v(\alpha_0, v_1, \alpha_1) \dots C_d^v(\alpha_{d-1}, v_d, \alpha_d)$$

и I_{α_d} – набор из R_d скалярных значений

$$I_{\alpha_d} = \int_0^{V_{\max}} C_1^u(\alpha_d, u_1, \alpha_{d+1}) f_1(\beta_0, u_1, \beta_1) du_1 \dots \int_0^{V_{\max}} C_d^u(\alpha_{2d-1}, u_d, \alpha_{2d}) f_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d.$$

Следовательно, если функции $C(\bar{v}; \bar{u})$ и $f(\bar{u})$ уже заданы в виде ГТ-формата и необходимо вычислить интегральный оператор с(2.36), то достаточно вычислить набор скалярных значений I_{α_d} и вычислить линейную комбинацию тензорных поездов $\widetilde{C}_{\alpha_d}^v(\bar{v})$ с этими скалярными коэффициентами. Вычисление интегралов вида I_{α_d} с помощью стандартных квадратурных формул (например, с помощью формулы трапеций) и дальнейшее вычислений линейных комбинаций функций, представленных в виде ГТ-формата — стандартные операции ГТ-арифметики [46, 48, 71] и могут быть выполнены за $O(dNR^4)$ операций.

В результате, значения $q(\bar{v})$ из (2.36) можно получить за $O(dNR^4)$ операций при помощи алгоритма 7, в котором мы опять пользуемся ГТ-крестовым методом. Так, сложность вычислительного алгоритма может быть оценена, как $O(d^2NR^4)$, т.е. формально возрастает в dR раз. На практике, мы наблюдаем обратное, так как ГТ-ранги используемых массивов, вычисленных при помощи ГТ-крестового метода оказываются меньше, чем в формальной

теоретической оценке. Таким образом, интегральный операторы вида (2.36) может быть вычислен с точностью $O(h^2)$ за $O(d^2NR^5)$ арифметических операций.

Algorithm 7 Trapezoidal TT-integration

- 1: **procedure** ИНТЕГРИРОВАНИЕ В ТТ-ФОРМАТЕ($C(\bar{v}; \bar{u}), f(\bar{v})$)
 - 2: ТТ-разложения для $f(\bar{v}), K(\bar{v}; \bar{u})$ с максимальным из ТТ-рангов равным R
 - 3: **for** $k = 1 \dots \alpha_d$ **do**
 - 4: $\widetilde{C}_{\alpha_d}^v(v_1, \dots, v_d) := \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{d-1}} C_1^v(\alpha_0, v_1, \alpha_1) \dots C_d^v(\alpha_{d-1}, v_d, \alpha_d)$
 - 5:
$$I_{\alpha_d} := \int_0^{V_{\max}} C_1^u(\alpha_d, u_1, \alpha_{d+1}) f_1(\beta_0, u_1, \beta_1) du_1 \dots$$

$$\dots \int_0^{V_{\max}} C_d^u(\alpha_{2d-1}, u_d, \alpha_{2d}) f_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d$$
 - 6: **end for**– R раз операции в ТТ-арифметике, с общей сложностью $O(dNR^2)$, следовательно, сложность этапа составит $O(dNR^3)$ операций
 - 7: $q(\bar{v}) := \text{TT-CROSS}(\sum_{\alpha_d=1}^{R_d} \widetilde{C}_{\alpha_d}^v(\bar{v}) I_{\alpha_d}) - O(dNR^3)$ вычислений значений со сложностью $O(dR^2)$ каждое, итого $O(d^2NR^5)$ операций
 - 8: **return** $q(\bar{v})$
 - 9: **Полная сложность составит** $O(d^2NR^5)$
 - 10: **end procedure**
-

Ускорение исходной схемы

В этом подразделе мы заканчиваем описание нашего метода снижения сложности схемы предиктор-корректор в применении к задаче Коши для многокомпонентного уравнения Смолуховского:

$$n^{k+\frac{1}{2}}(\bar{i}) = \frac{\tau}{2} (L_1(\bar{i})(n^k) - n^k(\bar{i})L_2(\bar{i})(n^k)) + n^k(\bar{i})$$

$$n^{k+1}(\bar{i}) = \tau \left(L_1(\bar{i})(n^{k+\frac{1}{2}}) - n^{k+\frac{1}{2}}(\bar{i})L_2(\bar{i})(n^{k+\frac{1}{2}}) \right) + n^k(\bar{i}).$$

Квадратурные формулы трапеций для вычисления интегральных операторов L_1, L_2 мы заменим на быстрые методы из двух предыдущих подразделов. Для вычисления значений оператора L_2 мы напрямую применяем алгоритм 7, представленный выше. Для вычисления оператора L_1 необходимо провести

следующие действия:

$$\begin{aligned}
& \int_0^{v_1} \dots \int_0^{v_d} C(\bar{v} - \bar{u}; \bar{u}) n(\bar{v} - \bar{u}, t) n(\bar{u}, t) du_1 \dots du_d = \\
& = \sum_{\bar{\alpha}, \bar{\beta}} \int_0^{V_{\max}} C_1^v(\alpha_0, v_1 - u_1, \alpha_1) n_1(\beta_0, v_1 - u_1, \beta_1) C_1^u(\alpha_d, u_1, \alpha_{d+1}) n_1(\beta_0, u_1, \beta_1) du_1 \times \\
& \dots \times \int_0^{V_{\max}} C_d^v(\alpha_{d-1}, v_d - u_d, \alpha_d) n_d(\beta_{d-1}, v_d - u_d, \beta_d) C_d^u(\alpha_{2d-1}, u_d, \alpha_{2d}) n_d(\beta_{d-1}, u_d, \beta_d) du_d = \\
& \sum_{\gamma_d} \int_0^{V_{\max}} \widetilde{C}_1^v(\gamma_0, v_1 - u_1, \gamma_1) \widetilde{C}_1^u(\gamma_{d-1}, u_1, \gamma_d) du_1 \dots \int_0^{V_{\max}} \widetilde{C}_d^v(\gamma_d, v_d - u_d, \gamma_{d+1}) \widetilde{C}_d^u(\gamma_{2d-1}, u_d, \gamma_{2d}) du_d,
\end{aligned}$$

где мы всего лишь разделяем переменные ядра коагуляции при помощи его представления в виде ТТ-формата и вычисляем поэлементные произведения его ядер ТТ-разложения с ядрами ТТ-разложения численного решения $n(\bar{v})$. Это можно проделать за $O(d^2NR^5)$ арифметических операций при помощи ТТ-крестового интерполяционного алгоритма. Так как необходимо вычислить порядка R поэлементных произведений по мультииндексу γ_d , общая сложность такой “подготовки” составит $O(d^2NR^6)$ действий.

Каждый из интегральных операторов и их сумму

$$\sum_{\gamma_d} \int_0^{V_{\max}} \widetilde{K}_1^v(\gamma_0, v_1 - u_1, \gamma_1) \widetilde{C}_1^u(\gamma_d, u_1, \gamma_{d+1}) du_1 \int_0^{V_{\max}} \widetilde{C}_d^v(\alpha_{d-1}, v_d - u_d, \alpha_d) \widetilde{C}_d^u(\gamma_{2d-1}, u_d, \gamma_{2d}) du_d$$

можно вычислить при помощи алгоритма 6 за $O(dR^2N \log N + d^2NR^5)$ операций. Так как операторов в сумме R штук, общая сложность алгоритма возрастает до $O(dR^3N \log N + d^2NR^6)$.

В результате, мы можем вычислить L_1 за $O(dR^3N \log N + d^2NR^6)$ арифметических операций и выполнить один шаг по времени в схеме предиктор-корректор за $O(dR^3N \log N + d^2NR^6)$ операций. В любом случае, предположение, что ТТ-ранги ядра коагуляции и решения уравнения Смолуховского (значения R) являются небольшими, является критически важным для эффективной работы алгоритма. Данное предположение нуждается, как минимум, как в теоретической, так и в практической верификации. В следующей главе мы приводим оценки некоторых ТТ-рангов для некоторых ядер коагуляции, а также для одного семейства аналитических решений задачи Коши

для двухкомпонентного уравнения Смолуховского.

Глава 3

Теоретические оценки рангов некоторых классов ядер коагуляции и аналитических решений

Данный раздел посвящен получению оценок значений рангов R разложений с разделенными переменными некоторых часто используемых в приложениях ядер коагуляции, а также одного семейства известных аналитических решений задач Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского. Мы покажем, что для достаточно широкого класса ядер ранги могут быть вычислены точно либо оценены, как медленно растущая функция, зависящая от роста точности ε разложения с разделенными переменными.

3.1 Оценки рангов некоторых классов ядер коагуляции

При моделировании физических процессов часто используются следующие ядра коагуляции [37], [17], [10], [5]:

$$C(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 \sqrt{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}}, \quad (3.1)$$

$$C(u, v) = u^\mu v^\nu + u^\nu v^\mu; \mu + \nu < 1; \mu \geq 0; \nu \geq 0, R \equiv 2 \quad (3.2)$$

$$C(u, v) = ((u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})(u^{-\frac{1}{3}} + v^{-\frac{1}{3}}))^3, \quad R \equiv 7 \quad (3.3)$$

а для следующих ядер

$$C(u, v) = 1, \quad R \equiv 1 \quad (3.4)$$

$$C(u, v) = uv, \quad R \equiv 1 \quad (3.5)$$

$$C(u, v) = u + v, \quad R \equiv 2 \quad (3.6)$$

при начальном условии

$$n(v, t = 0) = e^{-v} \quad (3.7)$$

существуют известные аналитические решения задачи Коши для уравнения Смолуховского [43], [34]. Ядро (3.2) принято называть ядром обобщённого умножения, а ядро (3.1) баллистическим (или броуновским). Отметим, что все приведённые ядра, кроме (3.1) уже представлены в виде разложений с разделёнными переменными с рангами $R \leq 7$. Сформулируем две теоремы из работ [83], [84], которые необходимы для получения теоретических оценок рангов R разложения с разделёнными переменными для баллистического ядра.

Теорема 1. [83]

Для любого $\beta > 0, 0 < \delta \leq 1$ и $0 < \varepsilon \leq \min \left\{ \frac{1}{2}, \frac{4}{\beta} \right\}$ существуют такие положительные p_m и w_m , что

$$\left| r^{-\beta} - \sum_{m=1}^R w_m e^{-p_m r} \right| \leq r^{-\beta} \varepsilon$$

c

$$R \leq \frac{c_\beta(2N+1)}{\pi} (\beta^{-1} \log 4(\beta\varepsilon)^{-1} + \log 2q\delta^{-1} + \log \log q(\delta\varepsilon)^{-1}),$$

где

$$c_\beta = \begin{cases} \beta, & 0 < \beta < 1 \\ 1, & 1 \leq \beta \end{cases},$$

N – любое натуральное число такое, что

$$\frac{2N!}{(2N+1)^{2N}} \leq \frac{\varepsilon}{4},$$

$$q = 2N - 1 + \beta \text{ и } r \in [\delta; 1].$$

Теорема 2. [84] Для любого $\beta > 0, 1 < P$ существуют такие положительные p_m и w_m , что

$$\left| r^{-\beta} - \sum_{m=1}^R w_m e^{-p_m r} \right| \leq r^{-\beta} \varepsilon$$

с числом слагаемых $R \leq \frac{\ln(\frac{8\sqrt{2}}{\varepsilon}) \log 8P}{\pi^2}$, где $r \in [1; P]$.

Теорема 3. Ядро $C(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 \sqrt{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}}$ можно приблизить разложением вида $C(u, v) \approx \sum_{\alpha=1}^R U_\alpha(u) V_\alpha(v)$ с относительной погрешностью ε на равномерной двумерной сетке с $N+1$ узлом по каждому из направлений u и v с числом слагаемых $R = O(\log \frac{N}{\varepsilon})$.

Доказательство. Отметим, что

$$C(u, v) = (u^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{1}{3}})^2 \sqrt{\frac{1}{u} + \frac{1}{v}} = \frac{(u^{\frac{2}{3}} + 2(uv)^{\frac{1}{3}} + v^{\frac{2}{3}}) \sqrt{u+v}}{\sqrt{uv}}.$$

Следовательно, чтобы приблизить функцию

$$C(u, v) \approx \sum_{\alpha=1}^R U_\alpha(u) V_\alpha(v)$$

достаточно построить такую же аппроксимацию для функции $\sqrt{u+v}$.

Заметим, что

$$\sqrt{x} \equiv x \frac{1}{\sqrt{x}} \quad (3.8)$$

На отрезке $x \in [\delta; 1]$ воспользуемся теоремой 5.1, а на отрезке $x \in [1; R]$ воспользуемся теоремой 5.2. При фиксированных значениях δ, R получим, что для числа слагаемых в построенных приближениях можно оценить, как $M = O(\log \frac{1}{\varepsilon})$. В результате, построений на рассматриваемых отрезках получим

$$\sqrt{x} \equiv x \frac{1}{\sqrt{x}} \approx x \sum_{m=1}^R (w_m e^{-p_m x}) \quad (3.9)$$

Подставляя $x = u + v$ в построенные аппроксимации для функции (3.8) на отрезке $x \in [V_{min}; 2V_{max}]$, получаем аппроксимацию для исходной функции вида

$$\sqrt{u + v} \approx (u + v) \sum_{m=1}^M (w_m e^{-p_m(u+v)})$$

с $M = O(\log \frac{1}{\varepsilon})$, которую очевидным образом можно привести к виду разложения с разделёнными переменными. \square

В случае уравнения для многокомпонентной коагуляции описанные ядра обобщаются в следующую форму

$$C(\bar{u}; \bar{v}) \equiv 1, \quad (3.10)$$

$$C(\bar{u}; \bar{v}) = \sum_{i=1}^d u_i + \sum_{i=1}^d v_i, \quad (3.11)$$

$$C(\bar{u}; \bar{v}) = \left(\sum_{i=1}^d u_i \right)^\nu \left(\sum_{i=1}^d v_i \right)^\mu + \left(\sum_{i=1}^d u_i \right)^\mu \left(\sum_{i=1}^d v_i \right)^\nu, \nu + \mu \leq 1, |\nu - \mu| \leq 2, \quad (3.12)$$

$$C(\bar{u}; \bar{v}) = \left(\left(\sum_{i=1}^d u_i \right)^{1/3} + \left(\sum_{i=1}^d v_i \right)^{1/3} \right)^2 \sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^d v_i} + \frac{1}{\sum_{i=1}^d v_i}}. \quad (3.13)$$

В случае двухкомпонентного уравнения Смолуховского для задач Коши с константным ядром (3.10) и следующего класса начальных условий

$$n(v_1, v_2, t = 0) = a b e^{-av_1 - bv_2}$$

хорошо известно следующее семейство аналитических решений (см. например, [85])

$$n(v_1, v_2, t) = \frac{a b e^{av_1 - bv_2}}{(1 + t/2)^2} I_0 \left(2\sqrt{\frac{a b v_1 v_2 t}{t + 2}} \right), \quad (3.14)$$

где a, b – любые положительные числа, а I_0 – модифицированная функция Бесселя нулевого порядка

В этом случае полная плотность частиц на единицу объёма может быть вычислена аналитически:

$$N(t) = \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{a b e^{av_1 - bv_2}}{(1 + t/2)^2} I_0 \left(2\sqrt{\frac{a b v_1 v_2 t}{t + 2}} \right) dv_1 dv_2 \equiv \frac{1}{1 + \frac{t}{2}}.$$

Также известны несколько примеров аналитических решений задачи Коши, записанных в виде быстро сходящихся рядов для аддитивного ядра (3.11) в случае двухкомпонентного уравнения Смолуховского [85] и несколько более сложных аналитических оценок интегральных характеристик решений [86].

Первые два ядра (ядра (3.10) и (3.11)) автоматически представлены в виде функций с разделенными переменными и, очевидно, что ГТ-ранги константного ядра (3.10) равны 1, а ГТ-ранги аддитивного ядра (3.11) равны 2.

Теорема 4. *Многокомпонентное ядро обобщённого умножения (3.12), а также многокомпонентное баллистическое ядро можно приблизить с точностью ε в области $(\bar{u}, \bar{v}) \in [0, L]^{2d}$ с помощью разложения с разделёнными переменными с числом слагаемых $R = O(\log \frac{1}{\varepsilon} \log L)$*

Доказательство. В случае ядра обобщённого умножения (3.12), мы снова воспользуемся результатами работ [83, 84], в которых доказано, что функции вида $\frac{1}{x^a}$, $1 \geq a > 0$ можно приблизить с помощью экспоненциальных сумм

$$\frac{1}{x^a} \approx \sum_{i=1}^R w_i e^{-p_i x},$$

на любом фиксированно отрезке $x \in [x_{\min}; x_{\max}]$, $L = x_{\max} - x_{\min}$ с числом слагаемых $O(\log \frac{1}{\varepsilon} \log L)$, где ε – относительная погрешность аппроксимации.

Так, мы просто заменим каждое из слагаемых вида $(\sum_{i=1}^d u_i)^\nu$ в ядре (3.12)

на

$$\left(\sum_{i=1}^d u_i\right)^\nu = \frac{\sum_{i=1}^d u_i}{\left(\sum_{i=1}^d u_i\right)^{1-\nu}} \approx \left(\sum_{i=1}^d u_i\right) \sum_{i=1}^R w_i e^{-p_i \sum_{i=1}^d u_i} := x \sum_{i=1}^R w_i e^{-p_i x}$$

на отрезке $x \in [x_{\min}; dx_{\max}]$, а далее на этом множестве применим теоремы [83, 84] и сможем утверждать что их ГТ-ранги растут как $O(\log \frac{1}{\varepsilon} \log L)$, где ε – погрешность аппроксимации.

Аналогичные оценки выводятся и для многокомпонентного баллистического ядра (3.13). Так, мы должны лишь напрямую воспроизвести доказательство теоремы 3, приведённой выше и воспользоваться таким же приёмом для оценок ГТ-рангов слагаемых $(\sum_{i=1}^d u_i)^\nu$. Следовательно ГТ-ранги этого ядра тоже растут как $O(\log \frac{1}{\varepsilon} \log L)$. \square

Таким образом, в этом разделе для широкого класса ядер коагуляции мы получили либо априорные точные значения их ГТ-рангов, либо доказали их медленный рост со скоростью $O(\log \frac{1}{\varepsilon} \log L)$, где ε – относительная точность аппроксимации, а L – “ширина”, области разложения, не зависящая от числа узлов N в используемой сетке.

3.2 Оценки рангов одного класса аналитических решений задачи Коши для уравнения Смолуховского

В этом разделе мы приводим оценки рангов одного известного класса аналитических решений задачи Коши для двухкомпонентного уравнения коагуляции Смолуховского с константным ядром и начальными условиями вида

$$n(v_1, v_2, t = 0) = a b e^{-av_1 - bv_2}.$$

Теорема 5. *Аналитические решения задачи Коши с константным ядром вида*

$$n(v_1, v_2, t) = \frac{a b e^{-av_1 - bv_2}}{(1 + t/2)^2} I_0 \left(2 \sqrt{\frac{a b v_1 v_2 t}{t + 2}} \right)$$

можно приблизить с помощью разложений с разделенными переменными

$$n(v_1, v_2, t) \approx \sum_{\alpha=1}^R V_{\alpha}^{(1)}(v_1, t) V_{\alpha}^{(2)}(v_2, t)$$

с относительной погрешностью ε и рангами $R = R(\varepsilon)$, не зависящими от числа узлов N в расчётной сетке.

Доказательство. Без потери общности предположим, что $a = b = 1$. Далее, пользуясь непосредственным определением модифицированной функции Бесселя, мы можем выписать следующий ряд

$$\begin{aligned} n(v_1, v_2, t) &= \frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} I_0 \left(2\sqrt{\frac{v_1 v_2 t}{t+2}} \right) = \\ &= \frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^k. \end{aligned}$$

Каждое из слагаемых приведённого ряда – функция с разделёнными переменными. Следовательно, для нахождения оценки ранга $R = R(\varepsilon)$, зависящей от погрешности приближения ε , необходимо оценить скорость сходимости “хвоста” приведённого ряда:

$$\begin{aligned} &\frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} \sum_{k=n}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^k \leq \\ &\frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^n \frac{1}{(n!)^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k!)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^k \leq \\ &\frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^n \frac{1}{(n!)^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(v_1 v_2)^k}{(k!)^2} \leq \\ &\frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^n \frac{1}{(n!)^2} \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(v_1)^k}{(k!)} \right) \left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{(v_2)^k}{(k!)} \right) \equiv \\ &\frac{e^{-v_1-v_2}}{(1+t/2)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^n \frac{1}{(n!)^2} e^{v_1+v_2} \equiv \\ &\frac{1}{(1+t/2)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^n \frac{1}{(n!)^2} < \varepsilon, \end{aligned}$$

При внимательном рассмотрении последнего неравенства с учётом $v_i \in [0, V_{\max}]$ получаем

$$\frac{1}{(1+t/2)^2} \left(\frac{v_1 v_2 t}{t+2} \right)^n \frac{1}{(n!)^2} \leq \frac{1}{(1+t/2)^2} \left(\frac{V_{\max}^{2n}}{(n!)^2} \right) \leq \varepsilon.$$

Уже теперь, очевидно, что значения n , удовлетворяющие полученному неравенству зависят лишь от чисел V_{\max} и ε и t . Отметим, что при $t \rightarrow \infty$ ε -ранг решения будет стремиться к нулю. В то же время, при малых t , пользуясь известной формулой Стирлинга, получаем, что достаточно найти n , удовлетворяющее следующему неравенству

$$\frac{1}{(1+t/2)^2} \left(\frac{V_{\max}^{2n}}{(n!)^2} \right) \leq \frac{1}{(1+t/2)^2} \left(\frac{(eV_{\max})^{2n}}{\sqrt{2\pi n}^{2n+\frac{1}{2}}} \right) \leq \varepsilon.$$

Логарифмируя полученное неравенство и исключая из него множитель $\frac{1}{(1+t/2)^2}$, как не зависящую от пространства константу, видим, что достаточно найти n такое, что

$$2n(\ln(\frac{V_{\max}}{n}) + 1) < \ln(\varepsilon) < 0.$$

Следовательно, имеем неравенства:

$$\begin{cases} \ln(\frac{V}{n}) + 1 \leq -1 \Rightarrow n \geq eV_{\max}, \\ 2n > |\ln(\varepsilon)| \Rightarrow n > \frac{|\ln(\varepsilon)|}{2}. \end{cases} \quad (3.15)$$

Так, искомое n есть $O(|\ln(\varepsilon)| + V_{\max})$, число не зависящее от числа узлов N по направлениям расчётной сетки, но от размеров области, а также от необходимой относительной точности аппроксимации. \square

Замечание: На практике (см. результаты в главе, посвящённой результатам численных экспериментов), мы наблюдаем почти постоянные ранги численных решений, следовательно, должны существовать лучшие малоранговые представления данного класса функций.

Таким образом, в данном разделе получены оценки ТТ-рангов для некоторых классов ядер коагуляции и для одного класса известных аналитических решений задачи Коши для уравнения Смолуховского. Эти результаты позволяют утверждать, что сформулированная новая методология будет эффек-

тивной в приложении к широкому классу задач Коши для уравнений типа Смолуховского.

К сожалению, мы не получили оценок ТТ-рангов общих решений для задач Коши для уравнений Смолуховского. Тем не менее, в следующей главе мы продемонстрируем полученные низкие ранги численных решений задач Коши.

Глава 4

Результаты численных экспериментов

4.1 Описание программного комплекса, применяемого для решения поставленных задач

В данной главе будут представлены результаты тестирования новых численных методов, предложенных выше. Основной целью данной главы является продемонстрировать, что сформулированные алгоритмы являются эффективными не только в теории, но и при решении практических задач математического моделирования. В главе будут представлены результаты тестирования новых методов для решения кинетических моделей агрегации и дробления однокомпонентного вещества, а также для решения многокомпонентного уравнения коагуляции с источниками и стоками частиц. Эффективность новые методов, основанных на применении тензорных разложений для ускорения схемы предиктор-корректор, будет продемонстрирована в сравнении с прямой реализацией исходного разностного подхода, а также в сравнении с методом Mass Flow Monte Carlo.

В процессе подготовки и проведения численных экспериментов был подготовлен комплекс программ, позволяющий проводить широкие наборы численных экспериментов. Для решения каждой из рассматриваемых задач подготовлен отдельный программный модуль, связанный с программным комплексом для построения тензорных разложений. Программный комплекс размещён в репозитории с использованием системы контроля версий *Git* по адресу https://bitbucket.org/matseralex/tt_smoluh. Краткое описание базовых директорий программного комплекса приведено в таблице 4.1.

Таблица 4.1: Описание директорий с модулями программного комплекса

Директория	Поддиректория	Содержащиеся модули
libtt		Директория с реализацией методов построения малоранговых матричных и тензорных аппроксимаций многомерных массивов
solvers		Директория с программными модулями, реализованными для численного решения рассматриваемых кинетических моделей
solvers	mass_flow	Директория с программной реализацией метода Mass Flow Monte Carlo для решения многокомпонентного уравнения коагуляции Смолуховского
solvers	one-dimensional	Директория с программными модулями для решения кинетических моделей агрегации и фрагментации однокомпонентного вещества
solvers	multidimensional	Директория с программными модулями для решения кинетических моделей коагуляции и дробления многокомпонентного вещества

В каждом из модулей необходимо задать функцию локального вычисления элементов ядра коагуляции и начального условия. В случае наличия членов дробления необходимо задать функцию локального вычисления значений кинетических коэффициентов фрагментации. Аналогично, по мере необходимости возможно задать функции источников и стоков частиц. При запуске без введённых параметров каждый программный модуль напечатает пользовательское сообщение с перечнем необходимых входных параметров соответствующей модели и численного алгоритма. Краткое описание программных модулей с реализацией алгоритмов решения уравнений моделей процессов агрегации и фрагментации вещества приведено в таблице 4.2.

Расположение модуля	Имя	Содержание модуля
solvers/mass_flow	smoluhovsky_2d_num_solv.f	Головной модуль программной реализации численного метода Монте Карло Mass Flow Coagulation решения многокомпонентного уравнения коагуляции, реализован на языке Fortran 95
solvers/multidimensional	Smoluh.py	Модуль программной реализации быстрого метода решения многокомпонентного уравнения коагуляции, реализован на языке Python, требуется предварительная установка пакета TTru с реализацией базовых алгоритмов работы с массивами в формате тензорного пакета

solvers/multidimensional	direct_2d.cpp	Модуль программной реализации прямого разностного подхода численного решения двухкомпонентного уравнения коагуляции Смолуховского, реализован на языке C++
solvers/multidimensional	tt_Smoluh_2.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода, снованного на рекурсивном применении ТТ-крестового алгоритма, реализован на языке C++
solvers/one-dimensional	cross_1d.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода решения непрерывного уравнения однокомпонентной коагуляции Смолуховского, реализован на языке C++
solvers/one-dimensional	direct_1d.cpp	Модуль программной реализации прямого разностного метода решения непрерывного уравнения однокомпонентной коагуляции Смолуховского, реализован на языке C++

solvers/one-dimensional	cross_colm.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода численного решения уравнений модели необратимой коагуляции с источником и стоком частиц, реализован на языке C++
solvers/one-dimensional	cross_brill.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода численного решения уравнений агрегации и фрагментации вещества в планетных кольцах Сатурна, реализован на языке C++
solvers/one-dimensional	parallel_brill.cpp	Модуль программной реализации параллельного быстрого метода численного решения уравнений агрегации и фрагментации вещества в планетных кольцах Сатурна, реализован на языке C++

solvers/one-dimensional	stationary_brill.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода на основе метода простой итерации поиска стационарных решений уравнений модели агрегации и фрагментации вещества в планетных кольцах Сатурна, реализован на языке C++
solvers/one-dimensional	anderson.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода на основе метода акселерации Андерсона поиска стационарных решений уравнений модели агрегации и фрагментации вещества в планетных кольцах Сатурна, реализован на языке C++
solvers/one-dimensional	soil_dynamic.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода решения уравнений локальной модели агрегации в почвенном профиле, реализован на языке C++

solvers/one-dimensional	soil_stationary.cpp	Модуль программной реализации быстрого метода на основе метода простой итерации поиска стационарных решений уравнений локальной модели агрегации в почвенном профиле
-------------------------	---------------------	--

Таблица 4.2: Описание модулей программного комплекса с реализацией численных алгоритмов решения кинетических моделей агрегации и фрагментации

Все модули реализованы на языке *C++*, кроме программного модуля с реализацией метода Mass Flow Monte Carlo (реализован на языке *Fortran95*) и модуля с реализацией метода решения многокомпонентного уравнения коагуляции с источниками и стоками частиц (реализован на языке *Python* с использованием операций пакета *TTru*).

Программный комплекс разработан для компиляции при помощи оптимизирующих компиляторов *Intel* с использованием технологий *MPI* и *OpenMP*, а также программных библиотек *MKL*, *VSL*, *GSL*. Сборка исполняемых файлов производится при помощи утилиты *Make*. Для визуализации результатов численных расчётов для каждого из реализованных модулей подготовлены скрипты на языке *Gnuplot*.

4.2 Результаты численных экспериментов по решению уравнений однокомпонентных моделей

4.2.1 Исследование модели агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна

Тестовые расчёты с ядром $C_{i,j} \equiv 1$ и $N(0) = 1$ для модели агрегации и фрагментации вещества в планетарных кольцах показали согласованность кластерной плотности численного решения с аналитической (таблица 4.3). Тестовые расчёты с баллистическим ядром подтвердили эффективность предложенной модификации численной схемы (таблица 4.4) – при больших значениях M получено ускорение исходной схемы более, чем в 1000 раз при согласованных кластерных плотностях численных решений, полученных исходной и ускоренной схемами.

Полученные ранги приближенных скелетных разложений баллистического ядра (таблица 4.8) согласуются с доказанной выше теоремой о верхней оценке числа слагаемых в разложении с разделёнными переменными. Для задачи Коши для непрерывного однокомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и начальным распределением $n(v, t = 0) = e^{-v}$ проведены тесты сходимости численного решения, получаемого с помощью алгоритмов, описанных в данной работе, к аналитическому (рис. 4.9).

Таблица 4.3: Время расчёта при $C_{ij} \equiv 1$, $N(0) = 1$ для $t \in [0; 10]$, $\lambda = 10^{-4}$

Число уравнений	Исходный метод, сек	Ускоренный метод, сек	Погрешность характеристики $N(t)$
1000	0.366	0.5829	0.004067
10 000	35.57	1.7543	0.004059
50 000	925.31	2.3103	0.004057

Таблица 4.4: Время расчёта при $C_{ij} = (i^{\frac{1}{3}} + j^{\frac{1}{3}})^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}$, $N(0) = 1$ для $t \in [0; 5]$, $\lambda = 10^{-4}$

Число уравнений	Исходный метод,сек	Ускоренный метод,сек	Погрешность характеристики $N(t)$
1000	101.15	0.4142	0.016
5 000	2 534.96	2.26535	0.022
10 000	10 162.4	9.18745	0.021

4.2.2 Масштабируемость параллельной реализации быстрого метода решения уравнений агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна

При программной реализации параллельного алгоритма решения той же модели использовалась версия дискретного параллельного преобразования Фурье, реализованная в библиотеке *Intel MKL*. Результаты тестирования данной операции согласуются с документацией к параллельному алгоритму дискретного преобразования Фурье библиотеки *Intel MKL* и теоретическими результатами по его масштабируемости [87] (см. рис. 4.1-4.2). Так как алгоритмическая сложность быстрого преобразования Фурье определяет алгоритмическую сложность полного алгоритма, масштабируемость данной операции определяет и масштабируемость параллельного алгоритма решения уравнений агрегации и фрагментации.

Тестовые расчёты с ядрами (3.1),(3.4) подтверждают эффективность параллельной реализации быстрого алгоритма: при больших значениях M получено ускорение алгоритма в десятки раз (см. таблицы 4.5 - 4.6). Для тестирования параллельной версии алгоритма использовались кластер ИВМ РАН и суперкомпьютер “Ломоносов”.

При использовании параллельной реализации быстрого алгоритма продемонстрировано качественное влияние значение параметра λ на решение задачи Коши для системы уравнений агрегации и фрагментации. Для задач, отличающихся только значением параметра λ получены стационарные решения и решения с периодически осциллирующей полной плотностью агрегатов

(рис. 4.3). Для выполнения закона сохранения массы при расчётах для малых значений $\lambda < 0.005$ численно решались конечные системы дифференциальных уравнений порядков вплоть до $M = 204\,800$.

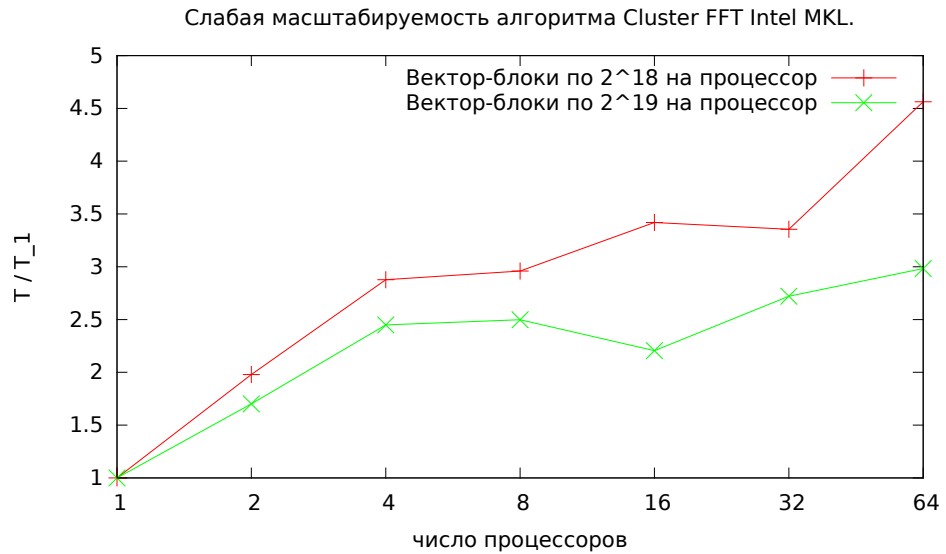


Рис. 4.1: Слабая масштабируемость алгоритма дискретного преобразования Фурье. Кластер ИВМ РАН.

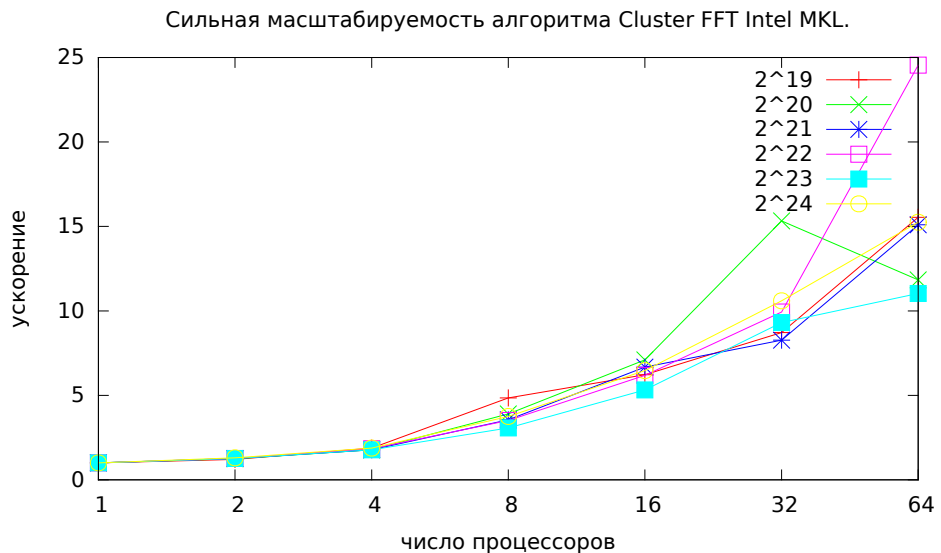


Рис. 4.2: Сильная масштабируемость алгоритма дискретного преобразования Фурье. Кластер ИВМ РАН.

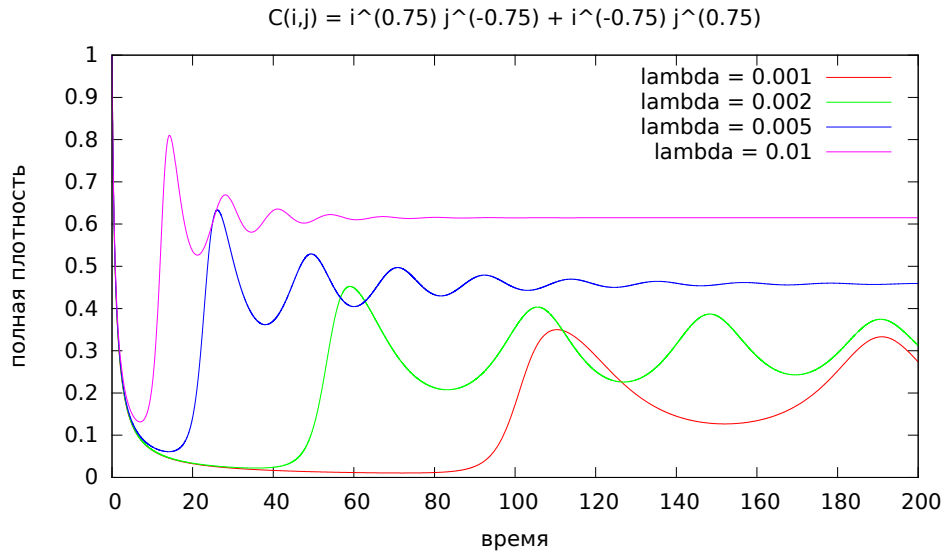


Рис. 4.3: Эволюция полной плотности агрегатов стационарных решений задачи Коши и решений с осциллирующей полной плотностью агрегатов. Начальное условие $n_{k_0} = \frac{1}{10}, k = \overline{1, 10}, n_{k_0} = 0, k > 10$; ядро $C(i, j) = i^{0.75} j^{-0.75} + i^{-0.75} j^{0.75}$. Для проведения расчётов использовался кластер ИВМ РАН.

Таблица 4.5: Время тестового расчёта при $M = 409\,600, C_{ij} = (i^{\frac{1}{3}} + j^{\frac{1}{3}})^2 \sqrt{\frac{1}{i} + \frac{1}{j}}, R = 16, t \in [0, 1], \lambda = 10^{-3}, \tau = 10^{-4}$. Кластер ИВМ РАН. Вычислительные узлы по 8 ядер (два 4-ядерных процессора Intel Xeon X5355@2.66ГГц).

Число ядер	Время, сек.	Ускорение
1	127 106	1.0
2	77 882	1.63
4	41 800	3.04
8	20 576	6.18
16	40 419	3.14
32	30 008	4.24
64	11 317	11.23

Таблица 4.6: Время тестового расчёта при $M = 4\,194\,304 \equiv 2^{22}$, $C_{ij} = 1$, $R = 1$, $t \in [0, 1]$, $\lambda = 10^{-3}$, $\tau = 10^{-3}$. Суперкомпьютер Ломоносов.

Число ядер	Время, сек.	Ускорение
1	4600	1.0
2	2687	1.71
4	1578	3.54
8	1052	4.37
16	675	6.81
32	464	9.91
64	267	17.28
128	185	24.86
256	104	44.23

4.2.3 Исследование модели необратимой коагуляции с источником мономеров

Тестовые расчёты по решению уравнений модели необратимой коагуляции с источником мономеров представлены на рисунках 4.4, 4.5. На рис. 4.4 представлены осцилляции полной массы численного решения систем кинетических уравнений, наблюдается рост периода и амплитуды колебаний с ростом числа уравнений в системе. На рис. 4.5 представлено сравнение численных стационарных решений конечной системы уравнений с аналитическим стационарным распределением частиц, в широких диапазонах размеров частиц, численное решение с высокой точностью позволяет приблизить аналитическое. Также на рис. 4.5 представлен график сходимости евклидовой нормы невязки для итерационного процесса по методу укорения Андерсона, сформулированного для решения системы нелинейных уравнений, соответствующих стационарной форме записи рассматриваемой математической модели. Из графика видно, что увеличение числа слоёв в итерационном процессе позволяет достичь сходимости в тех случаях, когда метод простой итерации (эквивалентный методу Андерсона с использованием 0 дополнительных слоёв) расходится. Полученные результаты не только совпадают с результатами работ [5, 15], но и дополняют их новыми результатами математического моделирования, так из рисунка 4.4 видно, что на период и амплитуду колеба-

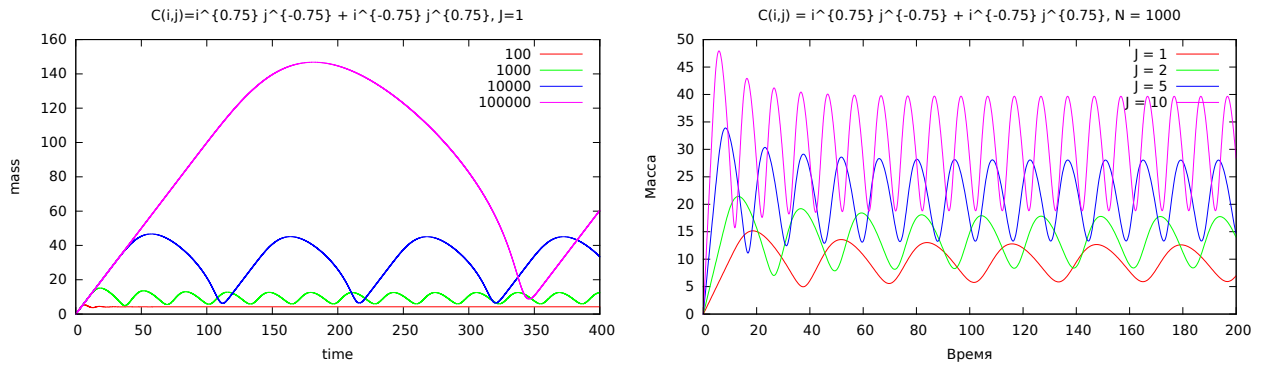


Рис. 4.4: Осцилляции полной массы численного решения модели процесса необратимой коагуляции с источником и стоком частиц.

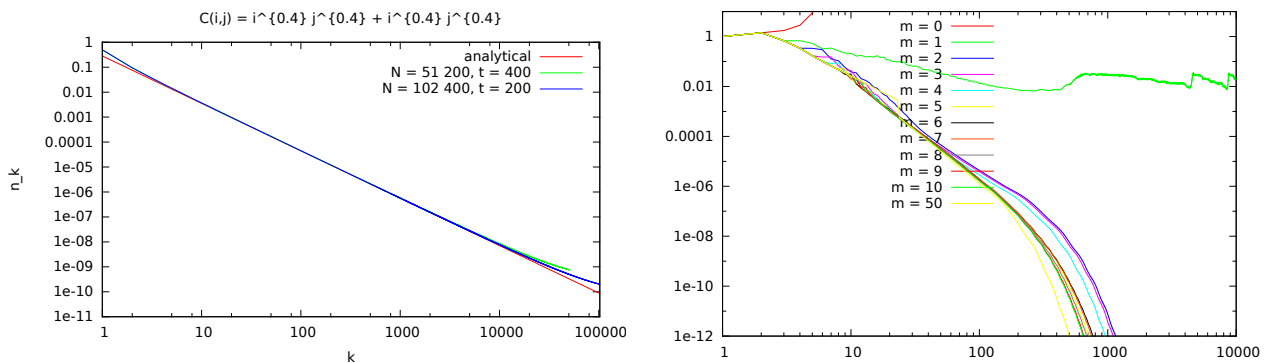


Рис. 4.5: Сравнение численных стационаров с аналитическим для математической модели необратимой коагуляции с источником мономеров (слева). Сходимость нормы невязки итерационного процесса метода акселерации Андерсона в зависимости от числа итераций (справа).

ний полной массы системы оказывает существенное влияние не только число уравнений в системе, но и мощность источника мономеров.

Производительность метода Андерсона для задачах с числом уравнений $2^{15} - 2^{17}$ продемонстрирована в таблице 4.7. Так, при использовании обычного персонального компьютера для системы из более чем 10^5 нелинейных уравнений найдено численное решение, гарантирующее евклидову норму невязки равную 10^{-12} менее, чем за два часа. Аналогичные расчёты по поиску стационарных решений с использованием исходного быстрого метода интегрирования по времени нестационарной задачи (см. метод, например, в [23]) на отрезок времени $t \in [0; 400]$ с числом уравнений $N = 10^5$ потребовали более 4 суток расчётного времени.

Из таблицы 4.7 также видно, что выбор значения параметра m существенно влияет на время вычислений. Так, например, при большем числе итераций в случае $N = 32768, m = 5$ для получения приближённого решения с евклидовой нормой невязки, равной 10^{-12} , потребовалось меньше вычислительного времени, чем в случае $N = 32768, m = 10$. Следовательно, максимальное ускорение с точки зрения используемого вычислительного времени по методу Андерсона может быть получено при конкретных значениях параметра m (в отличие от ускорения вычислений с точки зрения числа итераций, увеличивающегося с ростом m).

На рисунке 4.6 представлены графики сходимости евклидовой нормы невязки нелинейной системы. С ростом значения параметра модели a и числа уравнений в рассматриваемой системе сходимость метода Андерсона замедляется. Стоит отметить, что на всех рассматриваемых примерах метод простой итерации расходится, поэтому применение метода Андерсона вносит стабилизацию в сходимость итерационного процесса, при этом, если число комбинируемых слоёв m достаточно мало (см. таблицу 4.7), оказывается также невозможным получить сходимость численных решений, получаемых при помощи метода Андерсона.

4.2.4 Исследование локальной модели почвенной агрегации

Результаты исследований локальной модели агрегации в почвенном профиле с использованием быстрых численных методов, описанных в данной работе, представлены на рис. 4.8, 4.7. Представленные распределения частиц по размерам получены в результате совместного решения локальной модели агрегации и модели микробиологического цикла. Так, сначала решаются уравнения модели микробиологического цикла, порождающие распределение углеродного вещества по профилю почвы. Далее, на основании функции распределения органического вещества порождается набор задач Коши для уравнений локальной модели почвенной агрегации с одинаковыми начальными распределениями, но различными значениями параметра C , входящего в формулы ядер агрегации и фрагментации.

Итоговое распределение частиц по размерам, строится на основании усреднения полученных решений задач Коши с весами соответствующими содер-

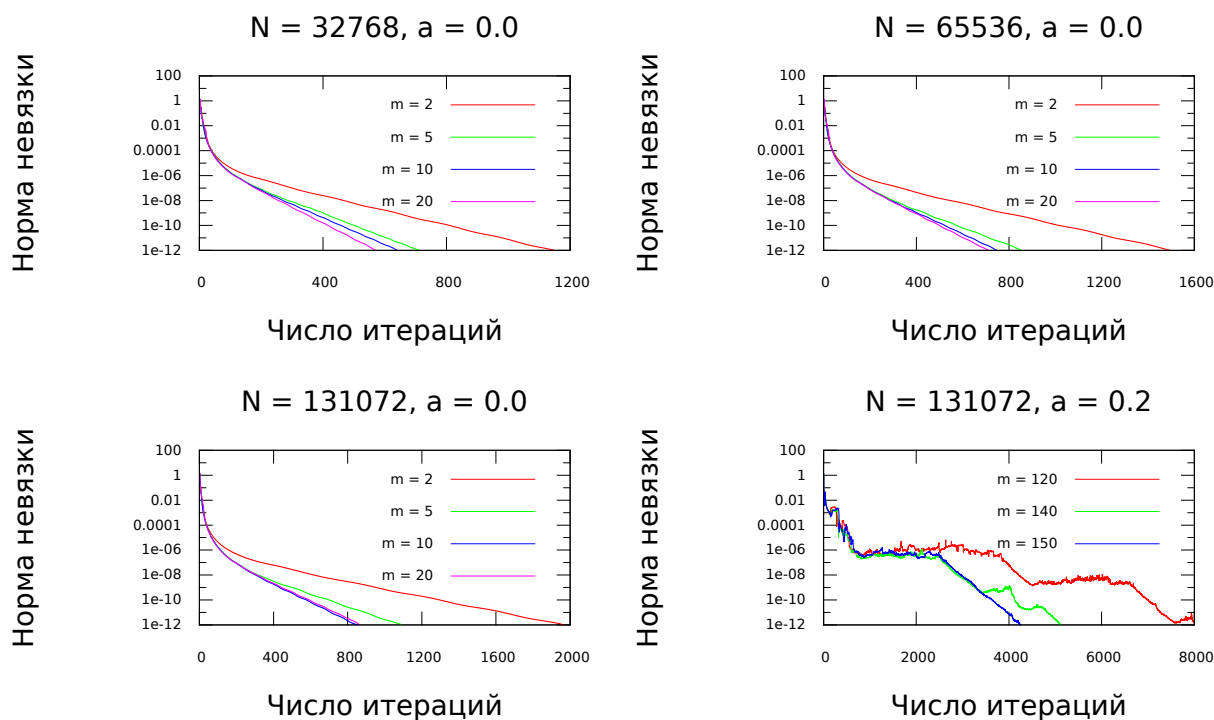


Рис. 4.6: Сходимость евклидовой нормы невязки численного решения метода ускорения Андерсона в зависимости от числа уравнений N , количества используемых слоёв m и значения параметра модели a . С ростом количества уравнений N в системе и параметра a растёт количество итераций, необходимых для достижения сходимости.

жанию органического вещества в сталкивающихся агрегатах. Так, на рис. 4.7 представлена эволюция усреднённого распределения почвенных агрегатов по размерам при конкретных значениях параметров модели $\alpha = 2, \beta = 3$. Из представленного графика видно, что в рамках рассматриваемой модели возможно получить сложные многомодальные распределения частиц по размерам. На рис. 4.8 представлены распределения почвенных агрегатов по размерам в зависимости от содержания минеральных примесей. Из экспериментов видно, что при насыщении почвы минеральными примесями распределения частиц по размерам становятся более узкими.

4.2.5 Результаты численных экспериментов для непрерывного уравнения Смолуховского

В таблице 4.8 представлены ранги приближенных скелетных разложений матрицы значений баллистического ядра коагуляции, полученных при по-

Таблица 4.7: Производительность метода акселерации Андерсона при сходимости по евклидовой норме невязки до 10^{-12} с нулевым начальным приближением вектора n_k .

Число уравнений	Показатель ядра a	Число слоёв	Число итераций	Время вычислений, сек
32 768	0.0	1	∞	∞
32 768	0.0	2	1151	6.46
32 768	0.0	5	712	5.61
32 768	0.0	10	641	7.38
32 768	0.0	20	571	11.21
65 536	0.0	1	∞	∞
65 536	0.0	2	1492	16.04
65 536	0.0	5	856	13.21
65 536	0.0	10	748	17.63
65 536	0.0	20	713	29.41
131 072	0.0	1	∞	∞
131 072	0.0	2	1964	44.93
131 072	0.0	5	1094	34.91
131 072	0.0	10	852	45.34
131 072	0.0	20	866	79.97
131 072	0.1	1	∞	∞
131 072	0.1	2	∞	∞
131 072	0.1	5	∞	∞
131 072	0.1	10	2486	152.21
131 072	0.1	20	1846	188.69
131 072	0.2	1	∞	∞
131 072	0.2	2	∞	∞
131 072	0.2	5	∞	∞
131 072	0.2	10	∞	∞
131 072	0.2	20	∞	∞
131 072	0.2	50	77 858	16 960.9
131 072	0.2	80	38 477	14 680.1
131 072	0.2	120	8029	5 188.21
131 072	0.2	140	5119	4 070.51
131 072	0.2	150	4252	3 722.89

мощи крестового интерполяционного алгоритма [47]. Малые значения рангов полученных разложений для сеток с числом узлов от 200 вплоть до 3 276 800 хорошо согласуются с доказанной выше теоремой и подтверждают возмож-

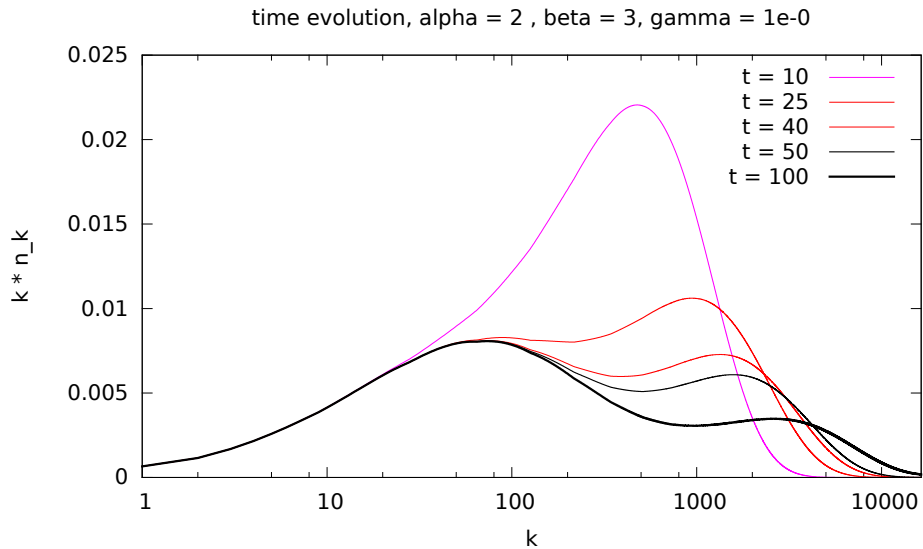


Рис. 4.7: Эволюция усредненного распределения агрегатов по размерам для локальной модели почвенной агрегации в терминах массовой концентрации. Рассматриваемая модель позволяет наблюдать сложные би-модальные распределения частиц по размерам. Формальная безразмерная насыщенность почвы минеральными веществами установлена равной 2.

ность эффективного использования сформулированной методологии.

На рисунке 4.9 и в таблицах 4.10 , 4.11 мы показываем, что полученное численное решение хорошо аппроксимирует известное аналитическое решение задачи Коши для уравнения Смолуховского с константным ядром и начальным условием $n(v, t = 0) = e^{-v}$. Из продемонстрированных экспериментов также следует, что новая методология позволяет получать численное решение рассматриваемой задачи без потери точности в сравнении с исходной схемой предиктор-корректор. Также мы наблюдаем, что новый метод позволяет получить гораздо лучшее приближение аналитического решения, чем метод Монте Карло из работы [17]. Итоговое сравнение новой методологии и метода Монте Карло с точки зрения роста вычислительного времени в зависимости от точности расчёта приведено на рис. 4.16.

Результаты численных экспериментов по решению задачи Коши для уравнения Смолуховского с баллистическим ядром и начальным условием $n(v, t = 0) = e^{-v}$ представлены на рис. 4.10, 4.11. Мы наблюдаем согласованность решений, полученных с помощью нового метода, предложенного в данной работе с решением, построенным при помощи стохастического алгоритма из [17].

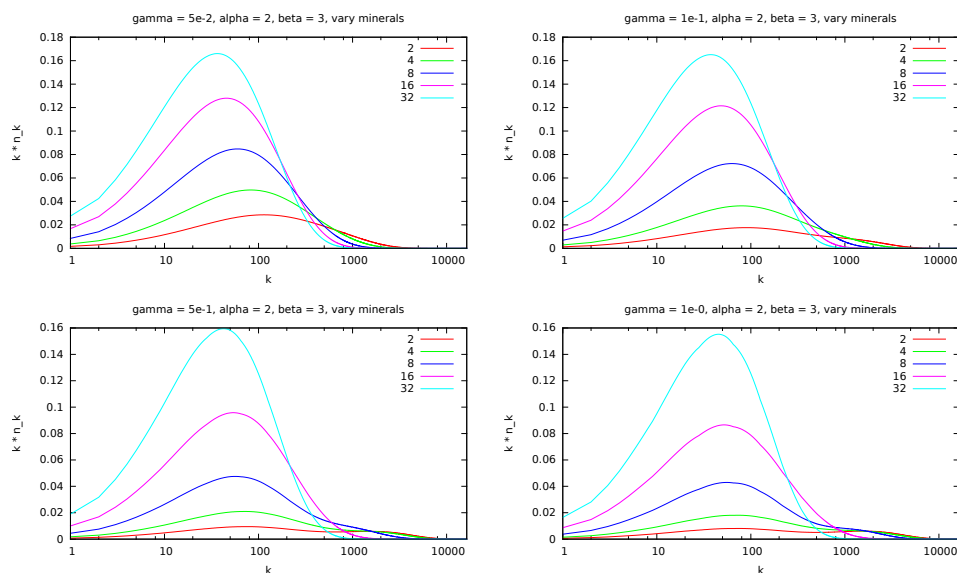


Рис. 4.8: Влияние содержания углерода на распределения почвенных агрегатов по размерам. По мере увеличения насыщенности почвенного профиля минералами мы получаем более “узкие” распределения частиц по размерам.

Из рис. 4.10 мы также наблюдаем, что численные решения, построенные с помощью нашего алгоритма при различных значениях параметра V_{\max} отличаются друг от друга гораздо меньше, чем решения алгоритма [17] с такими же различиями параметра V_{\max} , используемого в качестве верхней границы построения гистограммы по ансамблю частиц. Следовательно, мы можем полагать, что предлагаемая методология имеет лучшую скорость сходимости с ростом значения параметра V_{\max} , чем скорость сходимости метода Монте Карло из работы [17].

В таблицах 4.9 - 4.11 мы представляем более подробное сопоставление результатов вычислительных экспериментов для рассматриваемых численных методов решения однокомпонентного непрерывного уравнения Смолуховского. Таким образом, не только в теории, но и на практике мы доказываем, что ускоренная разностная методология является эффективной в применении к задачам со сложными ядрами коагуляции. Тем не менее отметим, что предложенная методология может быть менее эффективной в сравнении с исходной разностной, если число узлов в сетке оказывается достаточно малым.

Для проведения данных вычислительных экспериментов мы пользовались процессором *Intel Core i5-3330S @ 2.70GHz*.

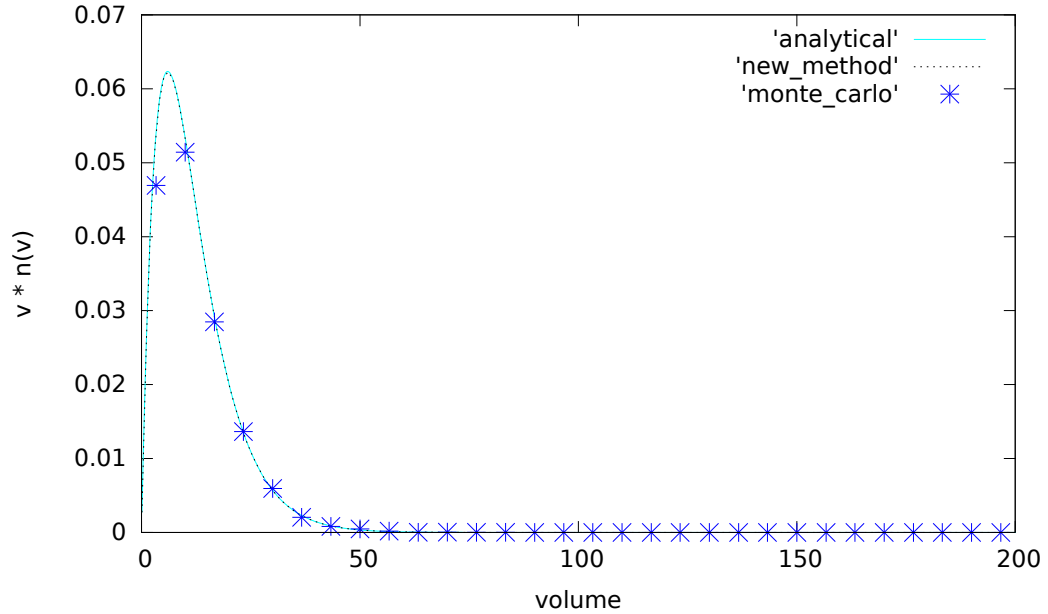


Рис. 4.9: Сравнение численных решений в момент времени $t = 10$, построенных с помощью нового метода (с параметрами $V_{\min} = 0.05$, $V_{\max} = 200$, $N = 2000$, $h = 0.1$, $\tau = 0.1$) и с помощью метода Монте Карло [17] (с 10^4 частицами) с аналитическим решением для задачи Коши с константным ядром и начальным условием $n_0(v) = e^{-v}$.

4.3 Результаты численных экспериментов по решению многокомпонентных моделей

В таблице 4.17 представлены максимальные ТТ-ранги приближённых ТТ-разложений ядер многокомпонентной коагуляции с помощью ТТ-крестового интерполяционного алгоритма. Представленные ранги полностью согласуются с теоретическими оценками, доказанными выше в данной работе. Результаты, представленные в таблице 4.12, позволяют утверждать, что аналитические решения задачи Коши для многокомпонентного уравнения Смолуховского можно хорошо приблизить с помощью малоранговых разложений не только в теории, но и на практике.

На рис. 4.12, 4.13 мы демонстрируем динамику решений задачи Коши для уравнения Смолуховского в терминах функции массовой концентрации частиц и наблюдаем физически корректное поведение численных решений.

В таблицах 4.12, 4.16 мы демонстрируем производительность быстрого метода, основанного на использовании ТТ-разложений в сравнении с исходной схемой предиктор-корректор. Мы наблюдаем качественное ускорение исход-

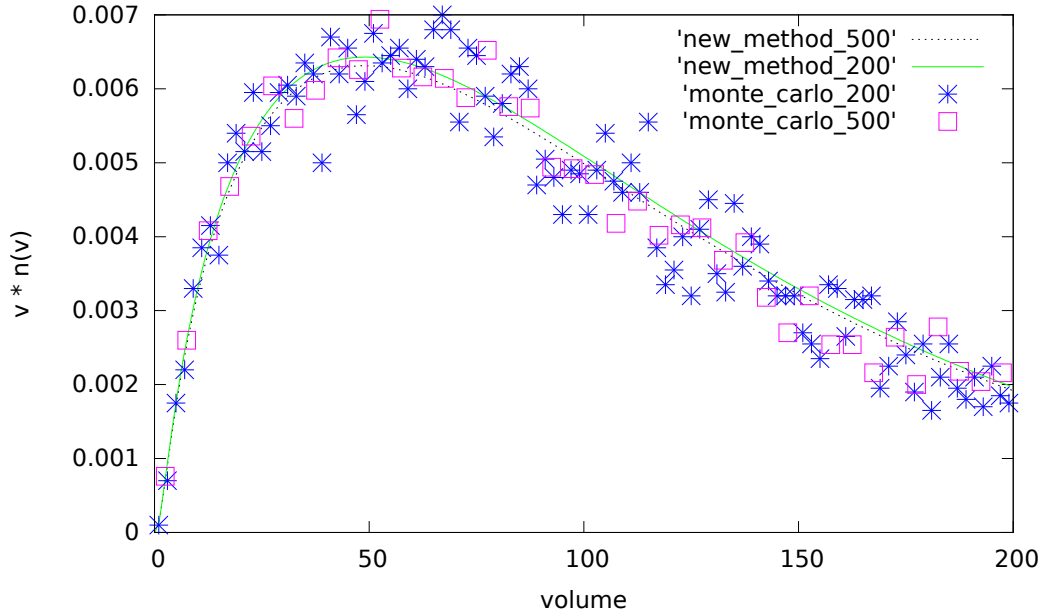


Рис. 4.10: Сопоставление численных решений задачи Коши для уравнения Смолуховского с баллистическим ядром в момент времени $t = 10$ и начальным условием $n_0(v) = e^{-v}$, построенных с помощью нового метода и с помощью метода Монте Карло с 10^4 частиц. С помощью непрерывных линий представлены решения, построенные с помощью нового метода с параметрами $V_{\max} = 500, V_{\min} = 0.05, h = 0.1, N = 5000, \tau = 0.1$ и $V_{\max} = 200, V_{\min} = 0.05, h = 0.1, N = 2000, \tau = 0.1$. Точками представлены решения стохастического метода 10^4 с верхними границами построения гистограмм $V_{\max} = 500$ и $V_{\max} = 200$.

ной разностной методологии без потери точности. Вычисления занимавшие несколько суток при использовании исходной схемы, теперь можно выполнить за 1-2 часа. Такое ускорение позволяет утверждать, что классические конечно-разностные схемы могут быть успешно применены для решения задач Коши для многокомпонентного уравнения Смолуховского.

Сравнивая результаты из таблиц 4.13, 4.12, мы заключаем, что методология Монте Карло является более быстрой в случае если необходимо производить вычисления с точностью порядка 1-2%, в то время как ТТ-метод позволяет получить численные решения с точностью в 10-100 раз, превышающей точность методов Монте Карло. Дополнительным преимуществом ТТ-методологии является возможность измерения ошибок численных решений в сильных нормах (например, в норме Фробениуса), что практически невозможно для методов Монте Карло даже с использованием 10^6 или 10^7 частиц. Например, даже в случае двухкомпонентного уравнения Смолуховского для

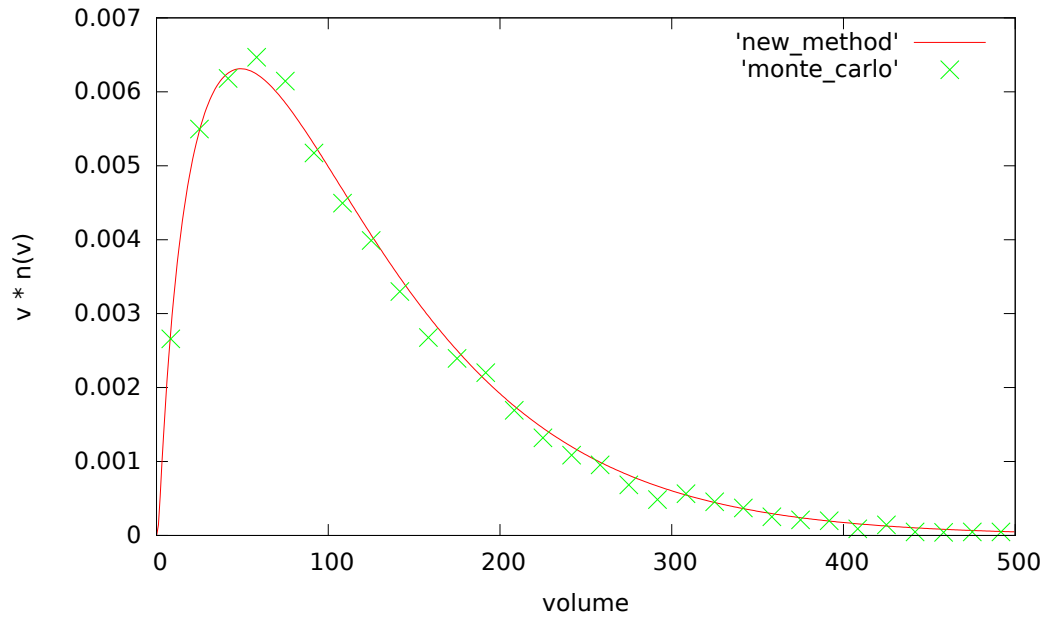


Рис. 4.11: Сопоставление численных решений задачи Коши для уравнения Смолуховского с баллистическим ядром и начальным условием $n_0(v) = e^{-v}$ в момент времени $t = 10$ с параметрами $V_{\min} = 0.05$, $V_{\max} = 500$, построенных с помощью новой методологии и с помощью метода Монте Карло с 10^4 частицами.

размещения гистограммы на сетку из лишь 1000×1000 узлов не каждому узлу можно будет сопоставить соответствующую популяцию частиц используемого ансамбля. В то же время, методы Монте Карло позволяют вычислять среднее число частиц на единицу объёма среды с достаточно высокой точностью, и на рис. 4.14 мы демонстрируем, что обе тестируемые методологии строят данную характеристику согласованно друг с другом. Однако, проверка сходимости численных решений при помощи проверки полного числа частиц на единицу объёма среды не является надёжной техникой, так как вообще говоря, данная интегральная характеристика не обязывает функции распределения частиц по объёмам быть близкими. Следовательно, можно утверждать, что разностная методология с использованием ТТ-разложений позволяет контролировать точность вычислений более педантично, чем методы Монте Карло.

Из таблиц 4.16 и 4.14 мы заключаем, что ТТ-метод позволяет находить численные решения, согласованные с результатами метода Монте Карло в случаях без известных аналитических решений. Так, даже сложные вычислительные эксперименты по моделированию процесса многокомпонентной ко-

Таблица 4.8: Численные оценки рангов скелетного разложения баллистического ядра коагуляции при помощи крестового интерполяционного алгоритма [47] при относительной погрешности приближения 10^{-6}

Число узлов по направлениям	Ранг
200	9
400	10
800	11
1 600	12
3 200	13
6400	14
12 800	14
25 600	14
51 200	16
102 400	17
204 800	17
409 600	17
819 200	17
1 638 400	17
3 276 800	17

Таблица 4.9: Сравнение эффективности численных методов решения задачи Коши для уравнения Смолуховского с баллистическим ядро на отрезке времени $t \in [0, 10]$. Новый метод тестировался при значениях параметров $V_{\min} = 0.05, h = 0.1, \tau = 0.1$, метод Монте Карло из работы [17] тестировался с 10^4 и ростом параметра V_{\max} .

V_{\max}	N	Предиктор-корректор, сек	Новый метод, сек	Метод [17], сек	из
100	1000	115.09	0.55	526.68	
200	2000	459.46	1.29	526.68	
500	5000	2877.71	5.35	526.68	

агуляции можно производить за сопоставимые (или даже меньшие) времена в сравнении с результатами использования методов Монте Карло.

Из таблицы 4.15 видно, что ТТ-методология позволяет проводить вычисления в случае задач Коши для уравнения Смолуховского с большим числом

Таблица 4.10: Сравнение эффективности и точности решений между схемой предиктор-корректор и новым быстрым методом решения задачи Коши для уравнения Смолуховского с константным ядром и начальным распределением частиц по размерам $n_0(v) = e^{-v}$ на отрезке времени $t \in [0, 10]$ с параметром $V_{\max} = 100$

τ	N	Предиктор-корректор, сек	Новый метод, сек	Относительная погрешность в норме L_2
0.3	300	0.006	0.05	$1.42 \cdot 10^{-2}$
0.1	1000	0.15	0.31	$1.2 \cdot 10^{-3}$
0.1	5000	3.99	0.16	$9.6 \cdot 10^{-4}$
0.05	10 000	33.53	2.04	$2.3 \cdot 10^{-4}$
0.01	10 000	168.08	9.85	$1.01 \cdot 10^{-5}$

Таблица 4.11: Результаты решения задачи Коши для уравнения Смолуховского с константным ядром и начальным условием $n_0(v) = e^{-v}$ на отрезке времени $t \in [0, 10]$ при помощи метода Монте Карло из работы [17].

N частиц	время, сек	Относительная погрешность в норме L_2
125 000	34.61	$2.59 \cdot 10^{-2}$
250 000	95.31	$1.82 \cdot 10^{-2}$
500 000	423.34	$1.48 \cdot 10^{-2}$
1 000 000	1161.43	$1.42 \cdot 10^{-2}$

компонент. Отметим также, что предлагаемая методология может работать медленнее схемы предиктор-корректор, если число узлов в используемой объёмной сетке – достаточно мало, а вычисление значений ядра коагуляции в узлах сетки не требует большого числа арифметических операций (например, в случае задач с константным ядром).

На рис. 4.15 демонстрируется сопоставление численных решений задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и стоком частиц, превышающих размер $V_{\max} = 20$ при мощности источника

$$J(v_1, \dots, v_d) = \exp(-(v_1 + \dots + v_d))$$

с численным решением классического уравнения коагуляции без источников

и стоков частиц. В результате экспериментов наблюдается численная сходимость решений многомерной модели с источниками и стоками частиц без существенного роста ТТ-рангов решения. Следовательно, предложенная методология решения задачи Коши для уравнения Смолуховского может быть эффективной для решения сложных математических моделей процессов коагуляции и дробления вещества.

При проведении вычислительных экспериментов мы пользовались процессором Intel Core i5-3330S @ 2.70GHz и python реализацией библиотеки работы с тензорами в ТТ-формате ТТ-Toolbox [88].

Таблица 4.12: Эффективность и точность нового метода в сравнении с прямой реализацией исходной разностной схемы предиктор-корректор в случае задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и известным аналитическим решением на отрезке времени $t \in [0; 10]$.

N	V_{\max}	τ	отн. погр. в $\ \cdot\ _F$	отн. погр. $N(t)$	ранг решения R	ре- сек	ТТ-метод, сек	прямой метод, сек
100	10	0.1	1.4e-1	1.2e-1	7	135	24	
200	20	0.1	2e-2	3e-2	9	210	332	
500	50	0.1	2.3e-3	4.6e-4	12	462	12 225	
1000	100	0.1	2.2e-3	1.6e-4	13	1024	215 580	
2000	100	0.05	5e-4	9.41e-5	13	2492	–	
4000	100	0.025	2e-4	1.2e-5	13	9614	–	

Таблица 4.13: Эффективность и точность метода Монте Карло в случае задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и известным аналитическим решением на отрезке времени $t \in [0; 10]$.

N частиц	время, сек	отн. погр. $N(t)$
2 000	0.45	5.2e-2
5 000	1.16	2.7e-2
10 000	3.8	2.5e-2
25 000	6.23	2.3e-2
100 000	36	1.8e-2
250 000	86	1.4e-2
1 000 000	451	1.7e-2

Таблица 4.14: Производительность метода Монте Карло в случае решения задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с баллистическим ядром $K(\bar{u}; \bar{v}) = \left((\sum_{i=1}^d u_i)^{1/3} + (\sum_{i=1}^d v_i)^{1/3} \right)^2 \sqrt{1/(\sum_{i=1}^d v_i) + 1/(\sum_{i=1}^d u_i)}$ на отрезке времени $t \in [0; 1]$.

N частиц	время, сек	$N(t = 1.0)$
5 000	19	0.189
10 000	31	0.1904
25 000	443	0.1873
50 000	522	0.1887
100 000	1213	0.19
250 000	4925	0.1895
500 000	14 170	0.1891
1 000 000	45 979	0.1897

Таблица 4.15: Сравнение производительности ГТ-метода и метода Монте Карло с 10^6 частицами в случае задач Коши для многокомпонентного уравнения Смолуховского высокой размерности на отрезке времени $t \in [0, 1]$.

N	V_{\max}	τ	d	ранг решения R	ГТ-метод, сек	ГТ-метод, $N(t = 1)$	Монте Карло, сек	Монте Карло, $N(t = 1)$
100	10	0.1	3	6	36	0.6632	689	0.6466
200	20	0.1	3	6	52	0.6651		
400	40	0.1	3	6	86	0.665		
800	40	0.05	3	7	312	0.6637		
100	10	0.1	4	15	96	0.6151	1173	0.6406
200	20	0.1	4	14	131	0.6225		
400	40	0.1	4	12	240	0.6569		
800	40	0.05	4	12	1014	0.6563		
100	10	0.1	5	13	166	0.651	2304	0.6324
200	20	0.1	5	19	291	0.6102		
400	40	0.1	5	17	542	0.622		
800	40	0.05	5	14	1678	0.6333		

Таблица 4.16: Сравнение производительности нового метода с прямой реализацией схемы предиктор корректор в случае решения задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с баллистическим ядром $K(\bar{u}; \bar{v}) = \left((\sum_{i=1}^d u_i)^{1/3} + (\sum_{i=1}^d v_i)^{1/3} \right)^2 \sqrt{1/(\sum_{i=1}^d v_i) + 1/(\sum_{i=1}^d v_i)}$ на отрезке времени $t \in [0, 1]$ при шаге по времени $\tau = 0.05$.

N	V_{\max}	Полная плотность при $t = 1.0$	Ранг решения	ГТ-метод, сек	прямой метод, сек
100	10	0.1847	12	212	1 684
200	20	0.1922	14	290	22 511
400	100	0.1943	15	403	425 182
800	200	0.1942	15	670	—
1600	200	0.1945	15	1561	—
3200	200	0.1944	18	2828	—

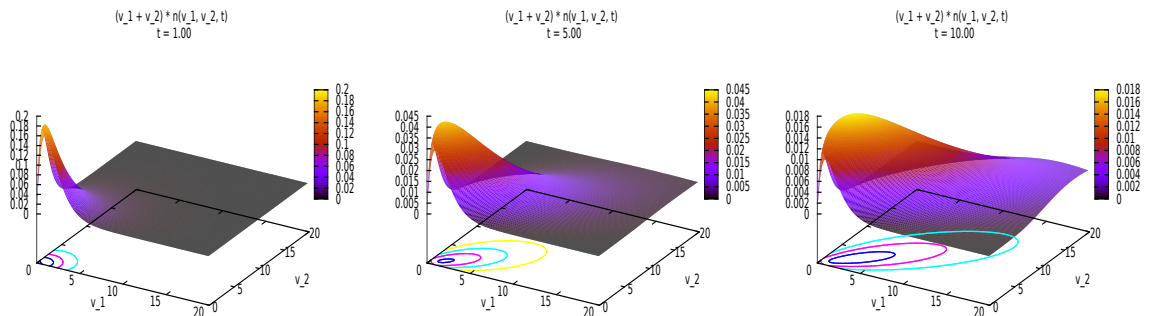


Рис. 4.12: Численное решение задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром в терминах массовой концентрации $(v_1 + v_2)n(v_1, v_2, t)$, построенное при помощи нового метода для в моменты времени $t = 1, 5, 10$. Пик массовой концентрации частиц смещается в направлении более крупных частиц. Относительная погрешность не превышает 2% в норме $\|\cdot\|_F$.

Таблица 4.17: ТТ-ранги ядер коагуляции, рассмотренных в данной работе. Отметим, что в случае d -компонентного уравнения коагуляции, ядра коагуляции являются функциями вдвое большей размерности. Параметр сходимости ТТ-крестового метода равен 10^{-6} по норме $\|\cdot\|_F$, размеры физических мод массивов установлены $N = 10^4$ во всех тестах.

V_{\max}	d	Ядро	max ТТ-rank R
100	2		17
1000	2	$(\sum_{i=1}^d u_i)^\nu (\sum_{i=1}^d v_i)^\mu + (\sum_{i=1}^d u_i)^\mu (\sum_{i=1}^d v_i)^\nu,$	19
1000	3	$\nu = 0.25, \mu = -0.25$	19
1000	4		20
1000	5		20
100	2		19
1000	2	$(\sum_{i=1}^d u_i)^\nu (\sum_{i=1}^d v_i)^\mu + (\sum_{i=1}^d u_i)^\mu (\sum_{i=1}^d v_i)^\nu,$	19
1000	3	$\nu = 0.75, \mu = -0.75$	20
1000	4		21
1000	5		23
100	2		19
100	3	$\left((\sum_{i=1}^d u_i)^{1/3} + (\sum_{i=1}^d v_i)^{1/3} \right)^2 \times$ $\sqrt{\frac{1}{\sum_{i=1}^d v_i} + \frac{1}{\sum_{i=1}^d u_i}}$	20
100	4		22
100	5		22
1000	2		19
1000	3		21
1000	4		23
1000	5		23

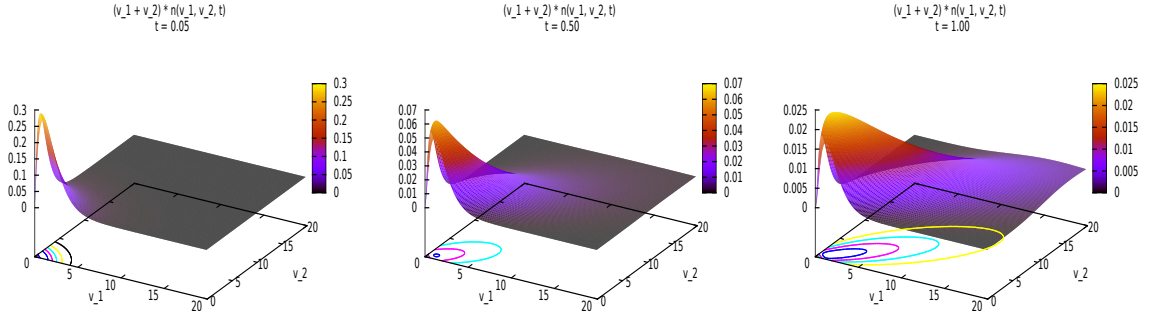


Рис. 4.13: Численное решение задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с баллистическим ядром $K(\bar{u}; \bar{v}) = \left((\sum_{i=1}^2 u_i)^{1/3} + (\sum_{i=1}^2 v_i)^{1/3} \right)^2 \sqrt{1/(\sum_{i=1}^2 v_i) + 1/(\sum_{i=1}^2 v_i)}$ в терминах массовой концентрации $(v_1 + v_2)n(v_1, v_2, t)$, построенное с помощью нового метода в моменты времени $t = 0.05, 0.5, 1$. Мы наблюдаем гораздо более быструю динамику процесса коагуляции, чем в случае константного ядра.

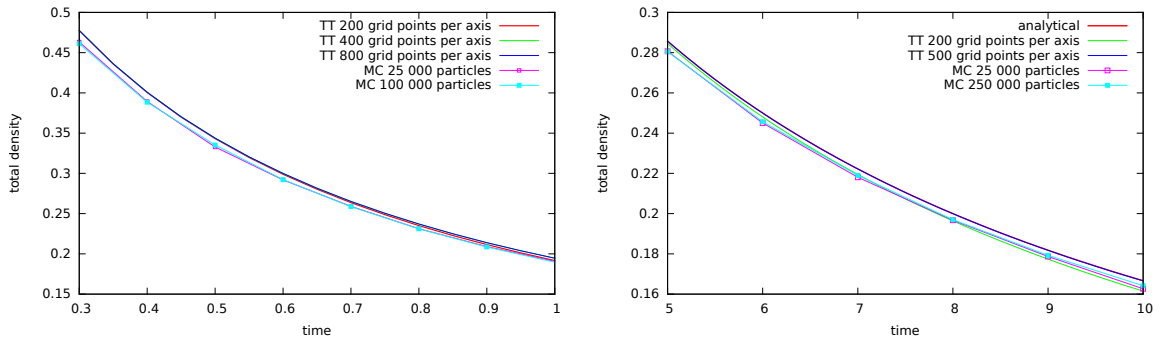


Рис. 4.14: Сходимость нового метода в терминах полной плотности частиц $N(t) = \int_0^\infty \int_0^\infty n(\bar{v}, t) du_1 du_2$ в сравнении с методом Монте Карло при решении задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с баллистическим ядром $K(\bar{u}; \bar{v}) = \left((\sum_{i=1}^2 u_i)^{1/3} + (\sum_{i=1}^2 v_i)^{1/3} \right)^2 \sqrt{1/(\sum_{i=1}^2 v_i) + 1/(\sum_{i=1}^2 v_i)}$ на отрезке времени $t \in [0.3; 1]$ (слева). Сходимость нового метода и метода Монте Карло в сравнении с точной формулой полной плотности частиц в случае задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром на отрезке времени $t \in [5; 10]$ (справа). Наблюдается согласованность численных решений, построенных с помощью разных методологий.

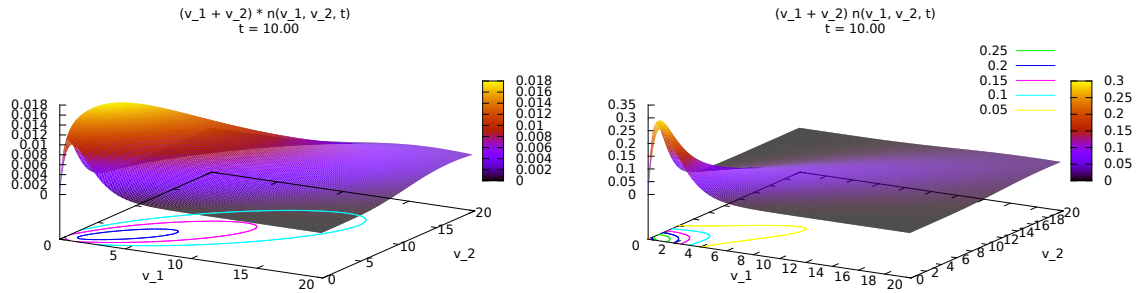


Рис. 4.15: Численное решение задачи Коши для уравнения Смолуховского с константным ядром в момент времени $t = 10.0$ без источников и стоков (слева) и решение задачи Коши для уравнения Смолуховского с тем же ядром, но с источником и стоком частиц (справа). Относительная ошибка численного решения первой задачи не превышает 2%.

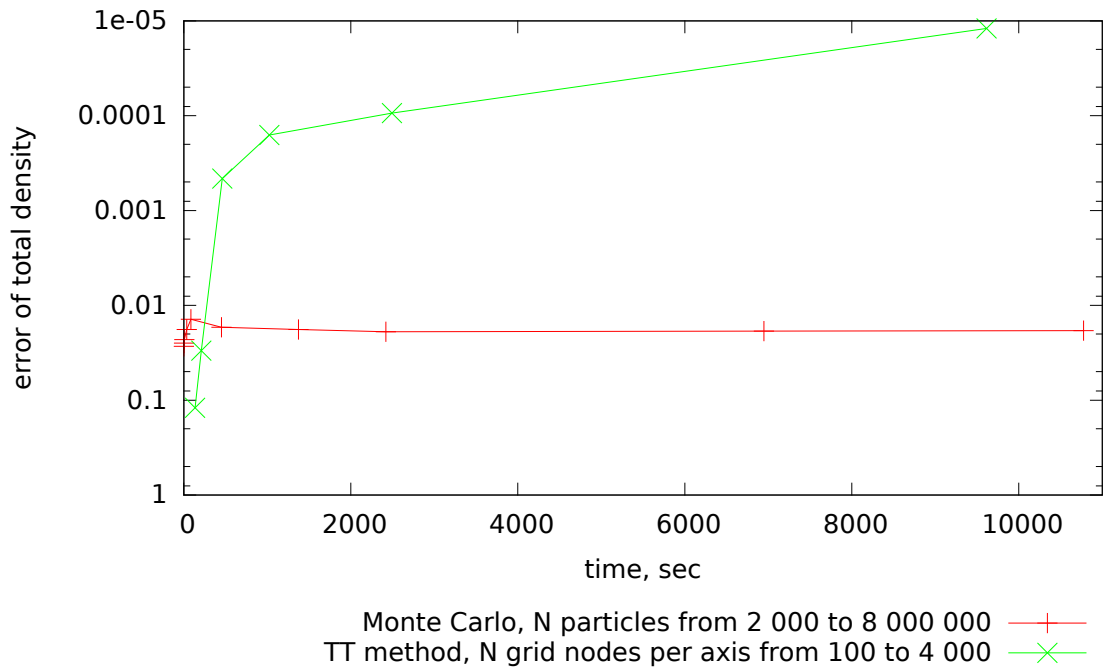


Рис. 4.16: Относительная погрешность в терминах полной плотности и вычислительное время ТТ-метода в сравнении с методом Монте Карло в случае задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и известным аналитическим решением.

Заключение

Диссертационная работа посвящена исследованию и построению эффективных алгоритмов численного решения систем кинетических уравнений процессов агрегации и фрагментации типа уравнений Смолуховского. Основным результатом работы: предложены и обоснованы новые эффективные алгоритмы численного решения уравнений математических моделей процессов коагуляции и дробления вещества и реализован комплекс программ для численного решения уравнений математических моделей, записанных в классе уравнений Смолуховского. Кроме того получены следующие частные результаты

- Предложены быстрые алгоритмы численного решения дискретных и непрерывных моделей агрегации и дробления однокомпонентного вещества.
- Предложена и протестирована эффективная схема распараллеливания предложенных методов решения однокомпонентных моделей.
- Предложены быстрые алгоритмы численного решения непрерывного многокомпонентного уравнения Смолуховского с источниками и стоками частиц.
- Предложен быстрый итерационный метод решения рассмотренных однокомпонентных моделей в стационарном виде.
- Получены оценки рангов функций ядер коагуляции: константного, аддитивного, мультипликативного, баллистического, обобщённого ядра умножения.
- Получены оценки рангов одного класса аналитических решений задач Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром.

- Эффективность предложенных методов сопоставлена с производительностью классической разностной схемы предиктор-корректор и с производительностью стохастической методологии.

Полученные теоретические результаты и комплекс программ значительно расширяют класс решаемых математических моделей агрегации и дробления вещества, а также позволяют существенно повысить робастность и точность расчётов. Кроме того, используя методы, разработанные в данной работе, можно построить новый класс эффективных итерационных методов численного решения уравнений моделей коагуляции и дробления вещества в стационарной форме, например, используя итерации квазиньютоновских методов в качестве основы для применения малоранговых тензорных разложений.

Литература

- [1] M von Smoluchowski. Drei vortrage uber diffusion, brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen. *Zeitschrift fur Physik*, 17:557–585, 1916.
- [2] H. Müller. Zur allgemeinen theorie ser raschen koagulation. *Fortschrittsberichte über Kolloide und Polymere*, 27(6):223–250, 1928.
- [3] N.V. Brilliantov, P.L. Krapivsky, A.S. Bodrova, F. Spahn, H. Hayakawa, V. Stadnichuk, and J. Schmidt. Particle size distribution in saturn’s rings: Aggregation-fragmentation model. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014.
- [4] J.N. Cuzzi, J.A. Burns, S. Charnoz, R.N. Clark, J.E. Colwell, L. Dones, L.W. Esposito, G. Filacchione, R.G. French, M.M. Hedman, et al. An evolving view of saturn’s dynamic rings. *Science*, 327(5972):1470–1475, 2010.
- [5] R.C. Ball, C. Connaughton, P.P. Jones, R. Rajesh, and O. Zaboronski. Collective oscillations in irreversible coagulation driven by monomer inputs and large-cluster outputs. *Physical review letters*, 109(16):168304, 2012.
- [6] R.C. Ball, C. Connaughton, T. HM Stein, and O. Zaboronski. Instantaneous gelation in Smoluchowski’s coagulation equation revisited. *Physical Review E*, 84(1):011111, 2011.
- [7] F.E. Cohen, K.-M. Pan, Z. Huang, M. Baldwin, R.J. Fletterick, and S.B. Prusiner. Structural clues to prion replication. *Science*, 264(5158):530–531, 1994.
- [8] M. Eigen. Prionics or the kinetic basis of prion diseases. *Biophysical chemistry*, 63(1):A1–A18, 1996.

- [9] А.Е. Алюн. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. *Курс лекций, ИВМ РАН*, 2002.
- [10] N.V. Brilliantov, A.S. Vodrova, and P.L. Krapivsky. A model of ballistic aggregation and fragmentation. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2009(06):P06011, 2009.
- [11] T. Pöschel, N.V. Brilliantov, and C. Frömmel. Kinetics of prion growth. *Biophysical journal*, 85(6):3460–3474, 2003.
- [12] Z. Kalay and E. Ben-Naim. Fragmentation of random trees. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 48(4):045001, 2015.
- [13] E. Ben-Naim and P.L. Krapivsky. Popularity-driven networking. *EPL (Europhysics Letters)*, 97(4):48003, 2012.
- [14] P.L. Krapivsky, S. Redner, and E. Ben-Naim. *A kinetic view of statistical physics*. Cambridge University Press, 2010.
- [15] H. Hayakawa. Irreversible kinetic coagulations in the presence of a source. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20(12):L801, 1987.
- [16] F.E. Kruis, A. Maisels, and H. Fissan. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation. *AIChE Journal*, 46(9):1735–1742, 2000.
- [17] E. Debry, B. Sportisse, and B. Jourdain. A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols. *Journal of Computational Physics*, 184(2):649–669, 2003.
- [18] A. Eibeck and W. Wagner. Stochastic particle approximations for Smoluchowski’s coagulation equation. *Annals of Applied Probability*, pages 1137–1165, 2001.
- [19] A. Kolodko, K.K. Sabelfeld, and W. Wagner. A stochastic method for solving smoluchowski’s coagulation equation. *Mathematics and Computers in Simulation*, 49(1):57–79, 1999.

- [20] K.K. Sabelfeld. A random walk on spheres based kinetic monte carlo method for simulation of the fluctuation-limited bimolecular reactions. *Mathematics and Computers in Simulation*, 2016.
- [21] A.A. Sorokin, V.F. Strizhov, M.N. Demin, and A.P. Smirnov. Monte-carlo modeling of aerosol kinetics. *Atomic Energy*, 117(4):289–293, 2015.
- [22] С.А. Матвеев, Е.Е. Тыртышников, А.П. Смирнов, Н.В. Бриллиантов. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского. *Вычислительные Методы и Программирование*, 15:1, 2014.
- [23] S.A. Matveev, A.P. Smirnov, and E.E. Tyrtysnikov. A fast numerical method for the cauchy problem for the Smoluchowski equation. *Journal of Computational Physics*, 282:23–32, 2015.
- [24] С.А. Матвеев. Параллельная реализация быстрого метода решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского. *вычислительные методы и программирование*, 16:361, 2015.
- [25] S.A. Matveev, D.A. Zheltkov, E.E. Tyrtysnikov, and A.P. Smirnov. Tensor train versus Monte Carlo for the multicomponent Smoluchowski coagulation equation. *Journal of Computational Physics*, 316:164–179, 2016.
- [26] A.P. Smirnov, S.A. Matveev, D.A. Zheltkov, and E.E. Tyrtysnikov. Fast and accurate finite-difference method solving multicomponent Smoluchowski coagulation equation with source and sink terms. *Procedia Computer Science*, 80:2141–2146, 2016.
- [27] С.А. Матвеев, А.П. Смирнов, Е.Е. Тыртышников. Решение уравнения Смолуховского с помощью ТТ-разложений с квадратичной сложностью. *тезисы конференции Тихоновские чтения 2013*, стр. 64, 2013.
- [28] С.А. Матвеев, А.П. Смирнов, and Е.Е. Тыртышников. Решение уравнения Смолуховского с помощью ТТ-разложений с квадратичной сложностью по числу узлов в расчётной сетке. *тезисы конференции МФТИ-56*, 2013.

- [29] С.А. Матвеев and Е.Е. Тыртышников. Быстрый метод решения кинетических уравнений агрегации и фрагментации. *тезисы конференции Ломоносовские чтения 2014*, стр. 50–51, 2014.
- [30] N.A. Vasilyeva , A. Vladimirov, A.P. Smirnov, S.A. Matveev, E.E. Tyrtysnikov, A. Yudina, E. Milanovski, and E.V. Shein. Self-organizing biochemical cycle in dynamic feedback with soil structure. *Geophysical Research Abstracts*, 18:EGU2016–10089–3, 2016.
- [31] S.A. Matveev. Parallel implementation of the fast method solving the kinetic equations of aggregation and fragmentation. *Theses of international conference on Matrix Methods in Mathematics and Applications-2015*, pages 64–65, 2015.
- [32] S.A. Matveev, E.E. Tyrtysnikov, and A.P. Smirnov. Fast method for systems of Smoluchowski-type kinetic equations. *Abstracts of the 8th International Congress on Industrial and Applied Mathematics*, pages 126–127, 2015.
- [33] N.A. Vasilyeva, A. Vladimirov, S.A. Matveev, A.P. Smirnov, E.E. Tyrtysnikov, and E.V. Shein. Microbially-driven soil aggregate structure formation. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, volume 19, page 11701, 2017.
- [34] В.А. Галкин. *Уравнение Смолуховского*. Физматлит, Москва, 2001.
- [35] L. Esposito. *Planetary rings*, volume 4. Cambridge University Press, 2006.
- [36] F. Leyvraz. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation. *Physics Reports*, 383(2):95–212, 2003.
- [37] G. Palaniswamy and S.K. Loyalka. Direct simulation Monte Carlo aerosol dynamics: coagulation and collisional sampling. *Nuclear technology*, 156(1):29–38, 2006.
- [38] A. Chaudhury, I.V. Oseledets, and R. Ramachandran. A computationally efficient technique for the solution of multi-dimensional PBMs of granulation

- via tensor decomposition. *Computers & Chemical Engineering*, 61:234–244, 2014.
- [39] Z.A. Melzak. A scalar transport equation. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 85:547–560, 1957.
- [40] V.I. Agoshkov and P.B. Dubovski. Solution of the reconstruction problem of a source function in the coagulation-fragmentation equation. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 17(4):319–330, 2002.
- [41] В. И. АГОШКОВ. *Избранные труды*. ИВМ РАН, 2016.
- [42] N.A. Vasilyeva, A. Vladimirov, A.P. Smirnov, S.A. Matveev, E.E. Tyrtysnikov, A. Yudina, E. Milanovskiy, and E. V. Shein. Self-organizing biochemical cycle in dynamic feedback with soil structure. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, volume 18, page 10089, 2016.
- [43] A.A. Lushnikov. Evolution of coagulating systems: III. Coagulating mixtures. *Journal of Colloid and Interface Science*, 54(1):94–101, 1976.
- [44] T.G. Kolda and B.W. Bader. Tensor decompositions and applications. *SIAM review*, 51(3):455–500, 2009.
- [45] E.E. Tyrtysnikov. *A brief introduction to numerical analysis*. Springer, 1997.
- [46] I.V. Oseledets. Tensor-train decomposition. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(5):2295–2317, 2011.
- [47] E. E. Tyrtysnikov. Incomplete cross approximation in the mosaic–skeleton method. *Computing*, 64(4):367–380, 2000.
- [48] I.V. Oseledets and E.E. Tyrtysnikov. TT-cross approximation for multidimensional arrays. *Linear Algebra and its Applications* 432 (1), 2008.
- [49] S.A. Goreinov, E.E. Tyrtysnikov, and N.L. Zamarashkin. A theory of pseudoskeleton approximations. *Linear Algebra and its Applications*, 261(1):1–21, 1997.

- [50] S.A. Goreinov and E.E. Tyrtysnikov. The maximal-volume concept in approximation by low-rank matrices. *Contemporary Mathematics*, 280:47–52, 2001.
- [51] Д.А. Желтков, Е.Е. ТЫРТЫШНИКОВ. Параллельная реализация матричного крестового метода. *вычислительные методы и программирование*, 16:369, 2015.
- [52] I.V. Oseledets, D.V. Savostianov, and E.E. Tyrtysnikov. Tucker dimensionality reduction of three-dimensional arrays in linear time. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 30(3):939–956, 2008.
- [53] S.L. Stavtsev. Application of the method of incomplete cross approximation to a nonstationary problem of vortex rings dynamics. *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*, 27(3):303–320, 2012.
- [54] S.L. Stavtsev. Application of the approximation multidimensional data method for solving dynamic problems. *Matematicheskoe Modelirovanie*, 24(12):65–71, 2012.
- [55] Д.В. Савостьянов. Быстрая полилинейная аппроксимация матриц и интегральные уравнения. *Кандидатская диссертация*, 2006.
- [56] V. Baranov and I.V. Oseledets. Fitting high-dimensional potential energy surface using active subspace and tensor train (AS+ TT) method. *The Journal of chemical physics*, 143(17):174107, 2015.
- [57] S. Zhao, T. Saluev, and D.L. Jones. Underdetermined direction of arrival estimation using acoustic vector sensor. *Signal Processing*, 100:160–168, 2014.
- [58] А.А. Каширин, С.И. Смагин, М.Ю. Талтыкина. Применение мозаично-скелетонного метода при численном решении трехмерных задач Дирихле для уравнения Гельмгольца в интегральной форме. *Журнал вычислительной математики и математической физики*, 56(4):625–638, 2016.
- [59] V. Kazeev, M. Khammash, M. Nip, and C. Schwab. Direct solution of the chemical master equation using quantized tensor trains. *PLoS Comput Biol*, 10(3):e1003359, 2014.

- [60] Q. Zhao, G. Zhou, S. Xie, L. Zhang, and A. Cichocki. Tensor ring decomposition. *arXiv preprint arXiv:1606.05535*, 2016.
- [61] J. Ballani, L. Grasedyck, and M. Kluge. Black box approximation of tensors in hierarchical Tucker format. *Linear algebra and its applications*, 438(2):639–657, 2013.
- [62] M. Bebendorf and C. Kuske. Separation of variables for function generated high-order tensors. *Journal of Scientific Computing*, 61(1):145–165, 2014.
- [63] Johan Håstad. Tensor rank is np-complete. *Journal of Algorithms*, 11(4):644–654, 1990.
- [64] Е. Е. Тыртышников *Основы алгебры*. Физматлит, Москва, 2017.
- [65] С.А. Матвеев. Вычисление тензорного ранга за конечное число операций. *Тезисы конференции Ломоносов-2013*, page 69.
- [66] И. В. Оселедец. Вычислительные тензорные методы и их применения. *Докторская диссертация*, 2012.
- [67] C. Garcia, A.L .and Van Den Broeck, M. Aertsens, and R. Serneels. A Monte Carlo simulation of coagulation. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 143(3):535–546, 1987.
- [68] H. Babovsky. On a Monte Carlo scheme for Smoluchowski’s coagulation equation. *Monte Carlo Methods and Applications*, 5(1):1–18, 1999.
- [69] K.F. Lee, R.I.A. Patterson, W. Wagner, and M. Kraft. Stochastic weighted particle methods for population balance equations with coagulation, fragmentation and spatial inhomogeneity. *Journal of Computational Physics*, 303:1–18, 2015.
- [70] A. Braumann, M. Kraft, and W. Wagner. Numerical study of a stochastic particle algorithm solving a multidimensional population balance model for high shear granulation. *Journal of Computational Physics*, 229(20):7672–7691, 2010.

- [71] V.A. Kazeev, B.N. Khoromskij, and E.E. Tyrtshnikov. Multilevel toeplitz matrices generated by tensor-structured vectors and convolution with logarithmic complexity. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(3):A1511–A1536, 2013.
- [72] E.E. Tyrtshnikov. Piecewise separable matrices. *Calcolo*, 42(3):243–248, 2005.
- [73] D.G. Anderson. Iterative procedures for nonlinear integral equations. *Journal of the ACM (JACM)*, 12(4):547–560, 1965.
- [74] M.A. Olshanskii and E.E. Tyrtshnikov. *Iterative methods for linear systems: theory and applications*. SIAM, 2014.
- [75] H. Fang and Y. Saad. Two classes of multiseant methods for nonlinear acceleration. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 16(3):197–221, 2009.
- [76] H.F. Walker and P. Ni. Anderson acceleration for fixed-point iterations. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 49(4):1715–1735, 2011.
- [77] P. Pulay. Convergence acceleration of iterative sequences. the case of scf iteration. *Chemical Physics Letters*, 73(2):393–398, 1980.
- [78] P. Pulay. Improved scf convergence acceleration. *Journal of Computational Chemistry*, 3(4):556–560, 1982.
- [79] K. Lipnikov, D. Svyatskiy, and Y.V. Vassilevski. Anderson acceleration for nonlinear finite volume scheme for advection-diffusion problems. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35(2):A1120–A1136, 2013.
- [80] A.P. Dempster, N.M. Laird, and D.B. Rubin. Maximum likelihood from incomplete data via the em algorithm. *Journal of the royal statistical society. Series B (methodological)*, pages 1–38, 1977.
- [81] A. Toth and C.T. Kelley. Convergence analysis for anderson acceleration. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 53(2):805–819, 2015.

- [82] F.A. Potra and H. Engler. A characterization of the behavior of the anderson acceleration on linear problems. *Linear Algebra and its Applications*, 438(3):1002–1011, 2013.
- [83] G. Beylkin and L. Monzón. On approximation of functions by exponential sums. *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 19(1):17–48, 2005.
- [84] D. Braess and W. Hackbusch. On the efficient computation of high-dimensional integrals and the approximation by exponential sums. In *Multiscale, nonlinear and adaptive approximation*, pages 39–74. Springer, 2009.
- [85] J.M. Fernandez-Diaz and G.J. Gomez-Garcia. Exact solution of Smoluchowski’s continuous multi-component equation with an additive kernel. *EPL (Europhysics Letters)*, 78(5):56002, 2007.
- [86] V.N. Piskunov. Analytical solutions for coagulation and condensation kinetics of composite particles. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 249:38–45, 2013.
- [87] A. Gupta and V. Kumar. The scalability of fft on parallel computers. *Parallel and Distributed Systems, IEEE Transactions on*, 4(8):922–932, 1993.
- [88] I.V. Oseledets, D.V. Savostyanov, S. Dolgov, and T. Saluev. TTPy package. <https://github.com/oseledets/ttpy>, 2012-2015.