

Стефонишин Даниил Александрович

—

**Тензорные разложения и их применение
к решению систем кинетических уравнений
с учетом множественных столкновений частиц**

Специальность 05.13.18 – «Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ»

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена на кафедре вычислительных технологий и моделирования факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова».

Научный руководитель: *академик РАН, д. ф.-м. н., профессор,*
Тыртышников Евгений Евгеньевич

Научный консультант: *к. ф.-м. н.,*
Матвеев Сергей Александрович

Официальные оппоненты: *д. ф.-м. н., профессор*
кафедры прикладной математики Бюджетного учреждения высшего образования Ханты-Мансийского автономного округа «Сургутский государственный университет»,

Галкин Валерий Алексеевич

к. ф.-м. н., старший научный сотрудник

Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»,

Бочев Михаил Александрович

Ведущая организация: *Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук*

Защита состоится «17» апреля 2019 г. в __:__ на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 в Институте вычислительной математики им. Г. И. Марчука Российской академии наук, расположенном по адресу: 119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ИВМ РАН
<http://www.inm.ras.ru>.

Автореферат разослан _____ 2019 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Ученый секретарь
диссертационного совета,

д. ф.-м. н., профессор

Бочаров Геннадий Алексеевич

Общая характеристика работы

Настоящая работа посвящена разработке и программной реализации эффективных алгоритмов организации вычислений для численного решения систем кинетических уравнений, описывающих процесс агрегации вещества при учете множественных столкновений частиц.

Актуальность темы. Математические модели процессов агрегации характеризуют взаимодействия огромного числа хаотически движущихся частиц сложной пространственно-однородной физической системы. Кинетические уравнения типа уравнений Смолуховского, лежащие в основе вышеупомянутых математических моделей, могут применяться для описания различных природных явлений и технологических процессов: динамики аэрозолей в атмосфере, описания процессов агрегации вещества в планетных кольцах, роста полимеров, кинетики белков-прионов и других.

В данных моделях учет исключительно бинарных столкновений частиц представляется разумным приближением в случае, когда рассматриваемая физическая система обладает невысокой плотностью. Однако же, в реальных физических процессах могут иметь место и одновременные соударения многих элементов системы. Эффект таких взаимодействий сказывается на эволюции системы, например, когда продукты множественных столкновений являются существенно более стабильными чем бинарных. При этом если свойства систем двухчастичных кинетических уравнений хорошо изучены, то сам вид многочастичных систем затрудняет их исследование и накладывает существенные ограничения на прямое применение классических вычислительных методов для их решения. Помимо прочего, причиной малой изученности многочастичных кинетических уравнений является формально экспоненциальный рост сложности необходимых для их численного решения вычислений, при увеличении максимального возможного числа частиц, участвующих в одном взаимодействии.

Основной целью диссертационной работы является построение эффективных алгоритмов, снижающих сложность вычислений правой части для многочастичных кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского при численном решении. Указанные алгоритмы основаны на использовании малоранговых аппроксимаций многомерных матриц, а также быстрых алгоритмов линейной алгебры. Кроме того, целью работы является теоретическое исследование предложенных алгоритмов, реализация разностных методов с их использованием в виде комплекса программ и моделирование реальных физических процессов, допускающих множественные столкновения частиц, при помощи разработанного программного комплекса. Также целью работы является доказательство корректности постановки рассматриваемой задачи Коши для обоснования применимости конечно-разностных методов.

Научная новизна. В работе предложены эффективные алгоритмы организации вычислений, снижающие сложность вычисления правой части для многочастичных кинети-

ческих уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского. Указаны оценки сложности новых алгоритмов, в том числе приводятся теоретические результаты, обосновывающие эффективность алгоритмов для ряда модельных задач многочастичной агрегации. Разностный метод с использованием разработанных алгоритмов реализован в виде комплекса программ. Точность разностного метода протестирована для модельной задачи с известным аналитическим решением и в сравнении с наивной реализацией разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка аппроксимации. Производительность реализаций разностных схем с использованием разработанных алгоритмов ускорения при сохранении точности решения оказывается в тысячи раз выше, чем при наивной их реализации. Для параллельной реализации разработанных алгоритмов приведены результаты экспериментов на масштабируемость. Предложенные в работе эффективные алгоритмы организации вычислений позволяют качественно расширить круг задач, доступных для детального изучения методами математического моделирования. Также в работе представлено теоретическое обоснование корректности постановки задачи Коши для рассматриваемых уравнений многочастичной агрегации, гарантирующее применимость конечно-разностных методов для ее приближенного решения.

Теоретическая ценность работы заключается в построении и оценке сложности эффективных алгоритмов организации вычислений правой части при численном решении задач Коши для систем кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского, допускающих множественные столкновения частиц. Важно отметить, что данные методы консервативны, то есть позволяют сохранять в процессе расчета так называемую полную массу системы на единицу объёма среды. Разработанные методы основаны на эффективных реализациях операций итерированных свёртки и умножения на вектор, при задействовании нескольких известных разложений с разделёнными переменными. В настоящей диссертационной работе приводятся указанные реализации, а также обосновываются теоретические оценки рангов разложений для ряда физически релевантных массивов кинетических коэффициентов. Кроме того, представлено теоретическое обоснование корректности постановки задачи Коши для рассматриваемых уравнений многочастичной агрегации.

Практическая ценность работы состоит в программной реализации разностных методов с предложенными эффективными алгоритмами организации вычислений на языке *C/C++* с использованием технологий параллельного программирования *OpenMP* и *MPI*. Разработанный программный комплекс позволяет проводить расчёты решения задачи Коши для кинетических уравнений, описывающих различные модели процесса многочастичной агрегации.

На защиту выносятся следующие результаты и положения: основной результат — разработаны эффективные алгоритмы организации вычислений и программный комплекс для решения уравнений математических моделей процессов агрегации, допускающих многочастичные столкновения. В частности:

- обоснованы эффективные последовательные и параллельные алгоритмы, снижающие сложность вычисления правой части для систем уравнений типа уравнений Смолуховского, допускающих множественные взаимодействия агрегатов;
- разностные методы с использованием разработанных алгоритмов ускорения реализованы в виде программного комплекса, проведён ряд численных экспериментов, иллюстрирующих эффективность и точность таких методов;
- с применением программного комплекса получены новые результаты математического моделирования физических процессов многочастичной агрегации;
- проведено доказательство корректности постановки задачи Коши для уравнений многочастичной агрегации.

Обоснованность научных положений. Достоверность результатов диссертационной работы обосновывается использованием в работе строгих математических выводов. Обоснованность выводов, сформулированных в диссертации, подтверждена квалифицированной апробацией на международных и российских научных конференциях и семинарах, а также публикациями результатов исследований в рецензируемых научных изданиях, в том числе, рекомендованных ВАК.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались

- на научных семинарах института вычислительной математики РАН им. Г. И. Марчука,
- семинарах кафедры вычислительных технологий и моделирования факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ имени М. В. Ломоносова,
- семинарах кафедры общей алгебры механико-математического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова,

а также на конференциях:

1. «Ломоносовские чтения 2014» (МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва, 2014);
2. 19th Conference of the International Linear Algebra Society «ILAS 2014» (Сеул, Корея, 2014);
3. The Sixth China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications (Москва, 2017);
4. X приокская научная конференция «Дифференциальные уравнения и смежные вопросы математики» (Коломна, 2018);

5. 3-rd International Conference on Computer Simulation in Physics and beyond (Москва, 2018);
6. 3-rd Annual Skoltech — MIT Conference «Collaborative Solutions For Next Generation Education, Science and Technology» Skolkovo Institute of Science and Technology (Москва, 2018);
7. XIX научная школа молодых ученых Института проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук (Москва, 2018).

Публикации. По теме работы были опубликованы 3 работы, среди которых 2 статьи [1, 2] — в журналах, рекомендованных ВАК и 1 статья [3] — в журнале, индексируемом Scopus. Также опубликована 1 работа [4] в сборниках тезисов и трудов конференций.

Личный вклад автора. В совместной работе [1] автор представил алгоритм ускорения численной схемы предиктор-корректор при использовании предопределенных канонических разложений для массивов кинетических коэффициентов в случае трехчастичных уравнений, разработал программную реализацию схемы с реализацией алгоритма и провёл вычислительные эксперименты, подтверждающие возможность практических расчетов для задачи многочастичной агрегации.

В совместной работе [2] автор развил идею работы [1], изложил алгоритм ускорения численной схемы предиктор-корректор при использовании тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов ТТ-разложением, разработал программную реализацию схемы с использованием алгоритма и провёл обширные вычислительные эксперименты для задачи многочастичной агрегации.

Работа [3] выполнена автором полностью самостоятельно. В работе автор предлагает схему вычисления главных рангов специальных полиномиальных матричнозначных отображений в связи с гипотезой о главном тензорном ранге трехмерных тензоров.

Диссертационное исследование является законченным и самостоятельным трудом автора.

Структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, списка используемых обозначений, четырех глав, заключения, списка литературы. Общий объем диссертационной работы составляет 92 страницы, включая 8 описаний алгоритмов, 10 рисунков, 12 таблиц и список литературы из 71 наименования.

Благодарности. Автор выражает благодарность академику РАН Тыртышникову Евгению Евгеньевичу за научное руководство и постоянную поддержку в исследованиях, научному сотруднику Сколковского института науки и технологий к. ф.-м. н. Матвееву Сергею Александровичу за неоценимую помощь и консультации, доценту факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова к. ф.-м. н. Смирнову Александру Павловичу за плодотворное научное сотрудничество, младшему научному сотруднику института вычислительной математики РАН Желткову Дмитрию Александровичу за полезные советы и предложения по написанию программного комплекса, старшему научному сотруднику института

вычислительной математики РАН к. ф.-м. н. Замарашкину Николаю Леонидовичу за замечания и предложения о форме и содержании настоящей работы, доценту Сколковского института науки и технологий Рыкованову Сергею Георгиевичу за помощь в проведении численных экспериментов и поддержку в написании настоящей работы. Отдельно автор хотел бы поблагодарить своих родителей Стефонишина Александра Григорьевича и Стефонишину Елену Михайловну без чьих заботы и внимания проведение данного исследования было бы невозможным.

Содержание работы

Во **введении** обоснована актуальность исследований, проводимых в рамках диссертационной работы, сформулированы ее цели и задачи, описана структура диссертации.

В **первой главе** излагаются предположения о рассматриваемых физических процессах. Приводится постановка задачи об эволюции системы неупруго сталкивающихся частиц, допускающих множественные взаимодействия. Процессы агрегации, допускающие единовременные столкновения не более D частиц, могут быть описаны формально бесконечной системой так называемых «многочастичными» обыкновенных дифференциальных уравнений типа уравнений Смолуховского. Уравнения относительно неизвестных компонент вектора концентраций

$$\mathbf{n}(t) = [n_1(t), n_2(t), \dots]^T$$

имеют следующий вид

$$\frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{c}^{(d)}; \mathbf{n}](t), \quad \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{c}^{(d)}; \mathbf{n}] \equiv \{\mathcal{P}^{(d)} + \mathcal{Q}^{(d)}\}[\mathfrak{c}^{(d)}; \mathbf{n}], \quad 2 \leq d \leq D,$$

где нелинейные операторы $\mathcal{P}^{(d)} = [\mathcal{P}_1^{(d)}, \mathcal{P}_2^{(d)}, \dots]^T$ и $\mathcal{Q}^{(d)} = [\mathcal{Q}_1^{(d)}, \mathcal{Q}_2^{(d)}, \dots]^T$ выражаются через постоянные элементы $C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \equiv C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)}$ массивов $\mathfrak{c}^{(d)} := [C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}]$ своими компонентами

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_k^{(d)}[\mathfrak{c}^{(d)}; \mathbf{n}] &:= \frac{1}{d!} \sum_{|\mathbf{i}_d|=k} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_d}, \\ \mathcal{Q}_k^{(d)}[\mathfrak{c}^{(d)}; \mathbf{n}] &:= -\frac{n_k}{(d-1)!} \sum_{\mathbf{i}_{d-1} \in \mathbb{N}^{d-1}} C_{\mathbf{i}_{d-1}, k}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_{d-1}}, \end{aligned}$$

$$\mathbf{i}_\lambda := (i_1, i_2, \dots, i_\lambda) \in \mathbb{N}^\lambda, \quad |\mathbf{i}_\lambda| := i_1 + i_2 + \dots + i_\lambda, \quad k \in \mathbb{N}, \quad 2 \leq d \leq D.$$

Кинетические коэффициенты $C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}$ являются симметричными и неотрицательными, имеют физический смысл частоты соударений частиц размеров i_1, i_2, \dots, i_d и определяются спецификой рассматриваемого процесса агрегации.

В главе описываются характеризующие систему величины, а именно полная концентрация частиц n и общая масса m вещества рассматриваемой физической системы:

$$n(t) := \sum_{k \geq 1} n_k(t), \quad m(t) := \sum_{k \geq 1} k \cdot n_k(t).$$

Помимо этого, приводятся аналитические решения задачи Коши для указанных многочастичных кинетических уравнений

$$\begin{cases} \mathbf{n}(0) = \mathbf{n}^{(0)}, \\ \frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{n}](t) \end{cases} \quad (1)$$

в модельных частных случаях. В связи с отсутствием известного аналитического решения в общем случае рассматриваются конечно-разностные методы решения указанной задачи на примере следующей схемы предиктор-корректор для $\alpha \in \mathbb{N} \cup \{0\}$:

$$\begin{cases} \mathbf{n}_N^{(0)} = [n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots, n_N^{(0)}]^T, \\ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1/2)} = \mathbf{n}_N^{(\alpha)} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}_N^{(\alpha)}], \\ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1)} = \mathbf{n}_N^{(\alpha)} + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}_N^{(\alpha+1/2)}]. \end{cases} \quad (2)$$

Обсуждается экспоненциальная сложность $O(N^D)$ лобового вычисления правой части для существующих численных методов и способы снижения сложности.

Во **второй главе** доказывається корректность постановки задачи Коши (1) для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского при элементах $C_{i_d}^{(d)}$ массивов кинетических коэффициентов $\mathfrak{C}^{(d)}$ из класса $\mathcal{B}^{(d)}$ ограниченных симметричных массивов. При заданных $0 \leq T < +\infty$ и $\nu \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ решение задачи Коши (1) ищется в классах покомпонентно непрерывных вектор-функций $\mathcal{F}(T) := \bigcup_{\mu > 0} \mathcal{F}(T, \mu)$ и $\mathcal{F}(T, 0, \nu) \subseteq \mathcal{F}(T, 0)$, где пространства $\mathcal{F}(T, \mu)$ и $\mathcal{F}(T, 0, \nu)$ снабжены соответствующими нормами

$$\|\mathbf{f}\|_{T, \mu} := \sup_{0 \leq t \leq T} \sum_{k \geq 1} e^{\mu k} \cdot |f_k(t)|, \quad \|\mathbf{f}\|_{T, 0, \nu} := \sup_{0 \leq t \leq T} \sum_{k \geq 1} (1 + k + k^2 + \dots + k^\nu) \cdot |f_k(t)|.$$

В разделе 2.1 приводится доказательство следующей теоремы

Теорема 1. При условиях неотрицательности ядер $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{B}^{(d)}$ для $2 \leq d \leq D$ и в предпо-

ложении принадлежности неотрицательной начальной функции $\mathbf{n}^{(0)}$ одному из классов

$$(i) \mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}(0, 0, \nu), \quad \nu \geq 0; \quad (ii) \mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}(0)$$

задача Коши (1) на множестве $\{(k, t) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R} : 0 \leq t \leq T\}$ имеет единственное в пространстве $\mathcal{F}(T, 0)$ неотрицательное решение из класса $\mathcal{F}(T, 0, \nu)$ в случае (i) и из класса $\mathcal{F}(T)$ в случае (ii).

При этом указанное решение непрерывно зависит от неотрицательных входных данных

$$(\mathbf{c}^{(2)}, \dots, \mathbf{c}^{(D)}; \mathbf{n}^{(0)}) \in \mathcal{B}^{(2)} \times \dots \times \mathcal{B}^{(D)} \times \mathcal{F}(0, 0),$$

при отображении указанного топологического произведения в пространство неотрицательных решений задачи Коши из $\mathcal{F}(T, 0)$ на множестве $\{(k, t) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R} : 0 \leq t \leq T\}$.

Доказательство данной теоремы разбито на несколько вспомогательных утверждений и лемм, приведенных в разделе 2.1. Данные рассуждения в значительной степени основываются на свойствах симметричности и непрерывности по каждому аргументу d -линейных форм $\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}]$ с компонентами

$$\mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] := \frac{1}{d!} \left\{ \sum_{|\mathbf{i}_d|=k} - \sum_{\mathbf{i}_d \in \mathbb{N}^d} \sum_{\lambda=1}^d \delta_{i_\lambda, k} \right\} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot f_{i_1}^{(1)} \cdot f_{i_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot f_{i_d}^{(d)}.$$

В разделе 2.2 приводятся утверждения о наличии свойств аппроксимации и устойчивости разностной схемы (2), гарантирующие сходимость ее решения к решению задачи Коши (1). Также в разделе излагаются рассуждения о необходимости ограничений на шаг по времени для разностных методов приближенного решения задачи Коши многочастичной агрегации соответственно росту кинетических коэффициентов.

В **третьей главе** приводятся необходимые сведения из теории малоранговых тензорных аппроксимаций. В разделе 3.1 перечисляются известные широко используемые разложения с разделенными переменными и связанные с ними понятия. Обсуждаются свойства канонического (полилинейного, CP) разложения. В таком разложении элементы тензора $\mathbf{c}^{(D)}$ представляются в следующем виде

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = \sum_{r=1}^R u_{i_1, r}^{(1)} \cdot u_{i_2, r}^{(2)} \cdot \dots \cdot u_{i_D, r}^{(D)}. \quad (3)$$

Основным преимуществом такого представления при малом ранге R является малое число $O(DRN)$ определяющих его параметров, а главный недостаток состоит в сложности получения разложения. В главе объясняется природа такого недостатка и связь с результатами алгебраической геометрии.

При наличии необходимости работы с многомерными массивами кинетических коэффициентов и из-за недостатков канонического разложения имеет смысл рассматривать ТТ-разложение (тензорный поезд), для которого существует достаточно быстрый и надежный способ получения аппроксимаций. В данном представлении элементы ядра $\mathfrak{C}^{(D)}$ можно записать в виде

$$C_{i_D}^{(D)} = \sum_{r_1, r_2, \dots, r_{D-1}}^R H_{r_0, i_1, r_1}^{(1)} \cdot H_{r_1, i_2, r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot H_{r_{D-1}, i_D, r_D}^{(D)}, \quad r_0 = r_D = 1. \quad (4)$$

Далее в разделе 3.2 описываются разработанные последовательные и параллельные эффективные алгоритмы ускорения вычислений в разностной схеме предиктор-корректор на основе применения рассмотренных малоранговых тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов и быстрых алгоритмов линейной алгебры.

Основную сложность в вычислении правой части разностной схемы (2) составляют затраты на вычисление компонент оператора \mathcal{P}_k для всех $1 \leq k \leq N$. Компоненты оператора $D! \cdot \mathcal{P}^{(D)}$ могут быть записаны в следующем виде

$$D! \cdot \mathcal{P}_k^{(D)} = \sum_{i_1=1}^{k-D+1} \sum_{i_2=1}^{k-D+2-|i_1|} \dots \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-|i_{D-3}|} \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-|i_{D-2}|} C_{i_{D-1}, k-|i_{D-1}|}^{(D)} \cdot n_{i_1} n_{i_2} \dots n_{i_{D-1}} \cdot n_{k-|i_{D-1}|},$$

$$1 \leq k \leq N.$$

Если подставить выражения для канонического разложения (3) в указанную выше формулу для компонент и изменить порядок суммирования, то в обозначениях $\widehat{u}_{i,r}^{(\lambda)} := u_{i,r}^{(\lambda)} \cdot n_i$ можно получить следующие равенства

$$D! \cdot \mathcal{P}_k^{(D)} = \sum_{r=1}^R \left[\sum_{i_1=1}^{k-D+1} \widehat{u}_{i_1,r}^{(1)} \cdot \dots \cdot \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-|i_{D-3}|} \widehat{u}_{i_{D-2},r}^{(D-2)} \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-|i_{D-2}|} \widehat{u}_{i_{D-1},r}^{(D-1)} \cdot \widehat{u}_{k-|i_{D-1}|,r}^{(D)} \right], \quad (5)$$

Далее можно заметить, что для номера компоненты $D-1 \leq k \leq N$ слагаемое в квадратной скобке при каждом $1 \leq r \leq R$ из правой части соотношения (5) является элементом под номером $k - D + 2$ итерированной дискретной свертки

$$\widehat{\mathbf{u}}_r^{(1)} * \widehat{\mathbf{u}}_r^{(2)} * \dots * \widehat{\mathbf{u}}_r^{(D)} \in \mathbb{R}^N, \quad \widehat{\mathbf{u}}_r^{(\lambda)} := \left[\widehat{u}_{1,r}^{(\lambda)}, \widehat{u}_{2,r}^{(\lambda)}, \dots, \widehat{u}_{N,r}^{(\lambda)} \right]^T.$$

Операция дискретной свертки арифметических векторов из N компонент может быть выполнена за $O(N \log N)$ операций посредством быстрого дискретного преобразования Фурье. Таким образом использование канонического разложения позволяет сократить сложность вычислений $O(N^D)$ наивных вычислений на каждом шаге схемы до $O(DNR \log N)$. Указанная схема вычислений представлена в следующем алгоритме

Алгоритм 1. Вычисление оператора $\mathcal{P}^{(D)}$ в точке \mathbf{n}_N .

Вход: Факторы $\mathbf{U}^{(\lambda)} = \left[\mathbf{u}_r^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{N \times R}$ приближенного СР-разложения тензора $C^{(D)}$,
где $\mathbf{u}_r^{(\lambda)} := \left[u_{1,r}^{(\lambda)}, u_{2,r}^{(\lambda)}, \dots, u_{N,r}^{(\lambda)} \right]^T$; вектор концентраций $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$.

Выход: Приближенное значение $\mathcal{P}^{(D)}[\mathbf{n}_N] \in \mathbb{R}^N$.

- 1: **Функция** СВЕРТКА В СР-ФОРМАТЕ($\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(2)}, \dots, \mathbf{U}^{(D)}, \mathbf{n}_N$)
- 2: $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$ ▷ $O(N)$ операций
- 3: **Для каждого** $r \leftarrow 1, 2, \dots, R$ **выполнить**
- 4: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{u}_r^{(D)} \circ \mathbf{n}_N$ ▷ Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 5: **Для каждого** $\lambda \leftarrow D-1, D-2, \dots, 1$ **выполнить**
- 6: $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{u}_r^{(\lambda)} \circ \mathbf{n}_N$ ▷ Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 7: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{y} * \mathbf{z}$ ▷ Дискретная свертка, $O(N \log N)$ операций
- 8: **Конец цикла**
- 9: $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \mathbf{y}$ ▷ $O(N)$ операций
- 10: **Конец цикла**
- 11: $\mathbf{x} \leftarrow \frac{1}{D!} \mathbf{L}^{D-1} \mathbf{x}$ ▷ Умножение на матрицу сдвига и скаляр, $O(N)$ операций
- 12: **Возвратить** \mathbf{x}
- 13: **Конец функции**

Полная сложность: $O(DRN \log N)$ арифметических операций.

Аналогичным образом, при использовании ТТ-разложения (4) при использовании обозначений $\widehat{h}_{r_{\lambda-1}, i, r_\lambda}^{(\lambda)} := h_{r_{\lambda-1}, i, r_\lambda}^{(\lambda)} \cdot n_i$ можно прийти к соотношениям

$$\begin{aligned}
D! \cdot \mathcal{P}_k^{(D)} &= \sum_{r_1}^{k-D+1} \sum_{i_1=1} \widehat{h}_{r_0, i_1, r_1}^{(1)} \cdot \dots \cdot \sum_{r_{D-2}}^{k-2-|\mathbf{i}_{D-3}|} \sum_{i_{D-2}=1} \widehat{h}_{r_{D-3}, i_{D-2}, r_{D-2}}^{(D-2)} \\
&\cdot \sum_{r_{D-1}}^{k-1-|\mathbf{i}_{D-2}|} \sum_{i_{D-1}=1} \widehat{h}_{r_{D-2}, i_{D-1}, r_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \widehat{h}_{r_{D-1}, k-|\mathbf{i}_{D-1}|, r_D}^{(D)}.
\end{aligned}$$

Таким образом одновременно для всех $D-1 \leq k \leq N$ значение компоненты $\mathcal{P}_k^{(D)}$ вычисляется в ходе последовательного по λ применения дискретных сверток по модовому индексу i_λ и суммирования полученных результатов вдоль рангового индекса r_λ . Указанный вычислительный процесс требует затратить $O(DR^2N \log N)$ арифметических операций. Процесс описан в следующем алгоритме

Алгоритм 2. Вычисление оператора $\mathcal{P}^{(D)}$ в точке \mathbf{n}_N .

Вход: Факторы $\mathfrak{H}^{(\lambda)} = \left[\mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N \times R_\lambda}$ приближенного ТТ-разложения тензора $\mathfrak{C}^{(D)}$, где $\mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} := \left[H_{r_{\lambda-1}, 1, r_\lambda}^{(\lambda)}, H_{r_{\lambda-1}, 2, r_\lambda}^{(\lambda)}, \dots, H_{r_{\lambda-1}, N, r_\lambda}^{(\lambda)} \right]^T \in \mathbb{R}^N$; вектор концентраций $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$.

Выход: Приближенное значение $\mathcal{P}^{(D)}[\mathbf{n}_N] \in \mathbb{R}^N$.

- 1: **Функция** СВЕРТКА В ТТ-ФОРМАТЕ($\mathfrak{H}^{(1)}, \mathfrak{H}^{(2)}, \dots, \mathfrak{H}^{(D)}, \mathbf{n}_N$)
- 2: **Для каждого** $r_{D-1} \leftarrow 1, 2, \dots, R_{D-1}$ **выполнить**
- 3: $\mathbf{x}_{r_{D-1}}^{(D-1)} \leftarrow \mathbf{h}_{r_{D-1}, 1}^{(D)} \circ \mathbf{n}_N$ ▷ Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 4: **Конец цикла**
- 5: **Для каждого** $\lambda \leftarrow D-1, D-2, \dots, 1$ **выполнить**
- 6: **Для каждого** $r_{\lambda-1} \leftarrow 1, 2, \dots, R_{\lambda-1}$ **выполнить**
- 7: $\mathbf{x}_{r_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \leftarrow \mathbf{0}$ ▷ $O(N)$ операций
- 8: **Для каждого** $r_\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, R_\lambda$ **выполнить**
- 9: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \circ \mathbf{n}_N$ ▷ Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 10: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{x}_{r_\lambda}^{(\lambda)} * \mathbf{y}$ ▷ Дискретная свертка, $O(N \log N)$ операций
- 11: $\mathbf{x}_{r_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \leftarrow \mathbf{x}_{r_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} + \mathbf{y}$ ▷ $O(N)$ операций
- 12: **Конец цикла**
- 13: **Конец цикла**
- 14: **Конец цикла**
- 15: $\mathbf{x}_1^{(0)} \leftarrow \frac{1}{D!} \mathbf{L}^{D-1} \mathbf{x}_1^{(0)}$ ▷ Умножение на матрицу сдвига и скаляр, $O(N)$ операций
- 16: **Возвратить** $\mathbf{x}_1^{(0)}$
- 17: **Конец функции**

Полная сложность: $O(DR^2N \log N)$ арифметических операций.

Еще более просто при использовании тензорных разложений вычисляются компоненты оператора \mathcal{Q} , что требует $O(DRN)$ и $O(DR^2N)$ операций соответственно для СР и ТТ разложений. Также важно отметить, что затраты по памяти при вычислении правой части на шаге схемы (2) составляют $O(DRN)$ и $O(DR^2N)$ ячеек памяти соответственно для канонического разложения и тензорного поезда супротив $O(N^D)$ при наивном вычислении.

Раздел 3.3 содержит необходимые теоретические оценки рангов канонических разложений и разложений в формате тензорного поезда для следующих типов модельных физически осмысленных массивов кинетических коэффициентов:

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv c, \quad c \geq 0; \quad (6)$$

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}, \quad \left| \sum_{\lambda=1}^D \mu_\lambda \right| < 1; \quad (7)$$

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = |\mathbf{i}_D|^\alpha, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (8)$$

Оценки тензорных рангов приводятся и для следующих ядер коагуляции, при $D = 2, 3$,

используемых при моделировании, в частности, катализа металлических наночастиц:

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} = (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2})^2 \sqrt{\frac{i_1 + i_2}{i_1 i_2}}; \quad (9)$$

$$C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sqrt{\frac{i_1 + i_2 + i_3}{i_1 i_2 i_3}} \cdot (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2} + \sqrt[3]{i_3})^2 \cdot \left[(\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2})^3 \sqrt{\frac{i_1 i_2}{i_1 + i_2}} + (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_3})^3 \sqrt{\frac{i_1 i_3}{i_1 + i_3}} + (\sqrt[3]{i_2} + \sqrt[3]{i_3})^3 \sqrt{\frac{i_2 i_3}{i_2 + i_3}} \right]. \quad (10)$$

Вид коэффициентов (9) общеизвестен, соответствующее ядро принято называть баллистическим. Ядро с элементами (10) может считаться обобщением баллистического ядра на случай трехчастичных столкновений. В данном случае соответствующие кинетические коэффициенты выведены по аналогии с бинарными из соображений симметрии.

Для ядра с постоянными кинетическими коэффициентами (6) оценки на тензорные ранги очевидны. Для ядра обобщенного умножения (7) доказана следующая теорема о ТТ-рангах:

Теорема 2. При заданных вещественных параметрах $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_D$ для ТТ-рангов R_λ D -мерного тензора размера $N \times N \times \dots \times N$ с элементами следующего вида

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv C_{\mathbf{i}_D}^{(D)}[\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_D] = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$$

выполнены ограничения

$$R_\lambda \leq \binom{D}{\lambda} \equiv \frac{D!}{\lambda! \cdot (D - \lambda)!}, \quad 0 \leq \lambda \leq D.$$

Для ядра обобщенного сложения (8) для рангов аппроксимаций каноническим (и, следовательно, ТТ) разложением доказана теорема

Теорема 3. Для заданных параметров $\varepsilon > 0$ и $0 < \alpha < 1$ тензор $\mathfrak{C}^{(D)} = [C_{\mathbf{i}_D}^{(D)}]$ размера $N \times N \times \dots \times N$ с элементами $C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = |\mathbf{i}_D|^\alpha$ может быть приближен по фробениусовой норме с относительной погрешностью ε каноническим разложением ранга DM , где $M = O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log DN)$.

Аналогичные оценки вида $O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log N)$ получаются для баллистического ядра и его обобщения из следующей теоремы.

Теорема 4. Для фиксированных величин $\varepsilon > 0$, $\beta > 0$ и $K > 1$ найдутся веса $w_\mu \in \mathbb{R}$ и показатели $s_\mu \in \mathbb{R}$, где $1 \leq \mu \leq M$ и $M = O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log K)$, при которых сразу для всех вещественных k из интервала $1 \leq k \leq K$ справедливо соотношение

$$\left| k^{-\beta} - \sum_{\mu=1}^M w_\mu e^{-s_\mu k} \right| \leq \varepsilon \cdot k^{-\beta}.$$

Полученные теоретические оценки подтверждают эффективность разработанных методов организации вычислений и возможность их применения для решений многочастичных уравнений типа уравнений Смолуховского, определяющих широкий класс математических моделей.

В **четвертой главе** излагается описание программного комплекса, реализующего разработанные в настоящей работе эффективные методы организации вычислений в схеме предиктор-корректор. Кроме того, в главе представлены результаты тестирования указанного быстрого разностного метода. В главе показывается, что разработанные алгоритмы эффективны при решении практических задач математического моделирования. Помимо этого, приводится ряд результатов моделирования реального процесса агрегации вещества.

Приводятся результаты численных экспериментов для модельных задач, в том числе для задачи, описывающей физический процесс роста металлических наночастиц, соответствующей кинетическим коэффициентам (9) и (10). В такой модели предполагается наличие бинарных и тернарных столкновений частиц атомов серебра в приближении жестких сфер. Модель для трехчастичных столкновений основывается на представлении об образовании промежуточного неустойчивого комплекса из любых двух частиц, стабилизация которого определяется столкновением с третьей частицей. Время жизни комплекса определяется характерным временем пребывания одной частицы вблизи другой при их свободном движении. Для рассматриваемых ядер (9) и (10) в таблице 1 приводятся значения максимальных рангов ТТ-аппроксимаций. Указанные ранги соответствуют теоретическим оценкам из главы 3.

Таблица 1. Сравнение максимальных рангов ТТ-аппроксимаций для массивов $\mathfrak{C}^{(D)}$ кинетических коэффициентов (9) и (10) в зависимости от точности ε приближения массива по норме и количества задействованных уравнений N .

D	Число уравнений N	10^2	10^3	10^4	10^5
2	$\varepsilon = 10^{-5}$	9	11	14	17
	$\varepsilon = 10^{-6}$	9	13	16	18
	$\varepsilon = 10^{-7}$	10	14	18	20
3	$\varepsilon = 10^{-5}$	9	12	13	14
	$\varepsilon = 10^{-6}$	11	15	16	19
	$\varepsilon = 10^{-7}$	13	16	18	23

Скорость трехчастичных столкновений по сравнению с двухчастичными для характерных значений физических характеристик частиц (размера, массы при фиксированной температуре среды) определяется параметром $\alpha_{3/2}$. Важно отметить, что при прочих равных условиях вклад трехчастичных столкновений существенно возрастает с увеличением размера частиц.

Последнее соображение подтверждается следующими результатами численных экспериментов. Наличие трехчастичных столкновений оказывает значительное влияние на ре-

шение задачи Коши, что отображено на рисунке 1 (слева) сравнения профилей решений с учетом и без учета трехчастичных столкновений. Видно, что концентрации больших частиц становятся ненулевыми в два раза быстрее при наличии относительно небольшой (20 процентов) частоты тройных взаимодействий.

Далее в главе сравниваются результаты расчетов при $\alpha_{3/2} = 0.05, 0.1, 0.2$, а также при отсутствии трехчастичных столкновений (то есть, когда $\mathfrak{C}^{(3)} = \mathbf{0}$). В качестве начального условия выбрано монодисперсное $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ для $k \in \mathbb{N}$. В экспериментах моделируются значения полной концентрации агрегатов $n(t)$ а также средние геометрический R_1 и объемный R_3 размеры агрегатов. Последние две величины задаются формулами

$$R_1(t) := m(t)/n(t), \quad R_3(t) := \sum_{k \geq 1} k^3 \cdot n_k(t)/n(t).$$

Из графика 1 (справа) следует, что с ростом скорости трехчастичных столкновений при фиксированной скорости двухчастичных средняя концентрация меняется незначительно. В то же время масса системы быстрее сосредотачивается в частицах больших размеров при росте параметра $\alpha_{3/2}$, что видно на графиках 2. Отсюда ясно, что присутствие многочастичных столкновений характерным образом сказывается на росте моментов решения

$$\sum_{k \geq 1} k^\xi \cdot n_k(t)$$

старших порядков ξ . Последнее означает, например, что большинство частиц системы имеют малый размер, однако основная масса системы сосредоточена в больших частицах. Таким образом наблюдается примерно в два раза больший рост среднего объемного размера при всего лишь 10-процентной относительной скорости трехчастичных столкновений.

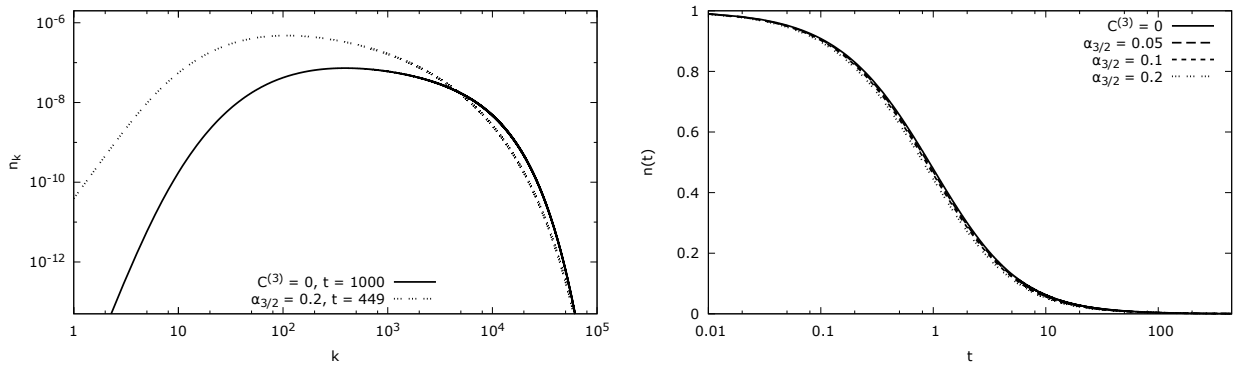


Рис. 1. Сравнение профилей решения задачи Коши (слева) в разные моменты времени t , соответствующей ядрам (9) и (10), с учетом и без учета трехчастичных взаимодействий. Также представлено сравнение полной концентрации агрегатов для задачи Коши (справа), соответствующей ядрам (9) и (10), при значениях $\alpha_{3/2} = 0.05, 0.1, 0.2$, и для двухчастичной задачи (когда $\mathfrak{C}^{(3)} = \mathbf{0}$). Для выполнения закона сохранения массы количество уравнений N адаптивно увеличивается от 2^{13} до 2^{17} с ростом времени t .

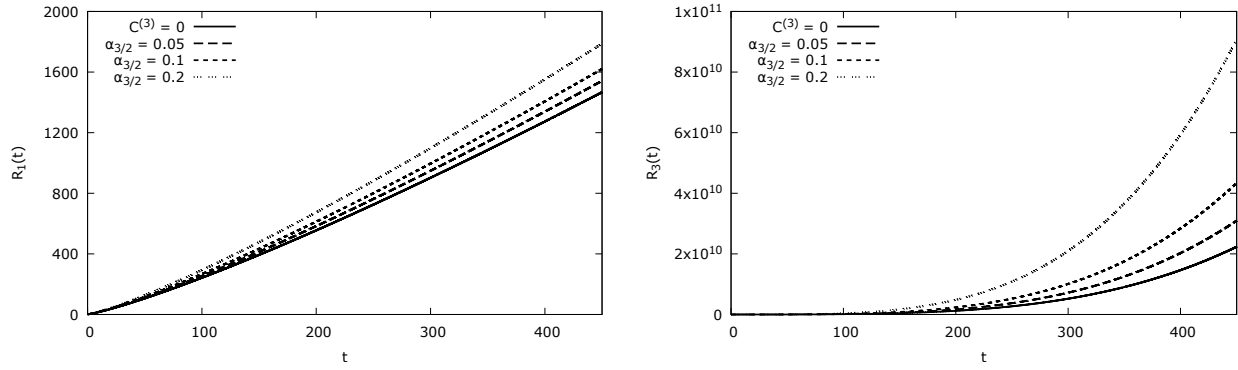


Рис. 2. Сравнение среднего геометрического (слева) и среднего объемного (справа) размера агрегатов для задачи Коши, соответствующей ядрам (9) и (10), при значениях $\alpha_{3/2} = 0.05, 0.1, 0.2$, и для двухчастичной задачи (когда $\mathcal{C}^{(3)} = \mathbf{0}$). Для выполнения закона сохранения массы количество уравнений N адаптивно увеличивается от 2^{13} до 2^{17} с ростом времени t .

Производительность разработанных алгоритмов, задействующих тензорные разложения для ускорения схемы предиктор-корректор, продемонстрирована в сравнении с наивной реализацией разностной схемы. Кроме того, представлены результаты тестирования параллельной версии алгоритмов на масштабируемость.

Данные алгоритмы реализованы при использовании параллельной версии быстрого дискретного преобразования Фурье ClusterFFT из библиотеки Intel MKL. В численных экспериментах были проведены замеры ускорений для трехчастичной агрегации (см. таблицу 2).

Также в настоящей главе было проведено сравнение ускорений для двухчастичной и трехчастичной агрегации. В случае тройных столкновений количество вычислений естественным образом значительно возрастает в силу использования тензорного поезда вместо обычного малорангового матричного разложения в бинарном случае. В полном соответствии со структурой ClusterFFT и сложностью задачи в трехчастичном случае необходимо увеличивать число N задействованных уравнений для достижения лучшей масштабируемости. Ускорения, полученные для случаев двухчастичной и трехчастичной агрегации показаны на рис. 3. Эксперименты были проведены с использованием оптимизирующих компиляторов Intel на суперкомпьютере Zhores Сколковского института науки и технологий (Intel(R) Xeon(R) Gold 6136 CPU @ 3.00GHz).

Число ядер	Время, сек
1	624.19
2	351.21
4	186.83
8	100.33
16	52.02
32	33.74
64	27.74
128	24.80

Таблица 2. Ускорения времен расчета для параллельной реализации эффективных вычислений оператора трехчастичной агрегации. Число уравнений $N = 2^{19}$. Количество итераций 10.

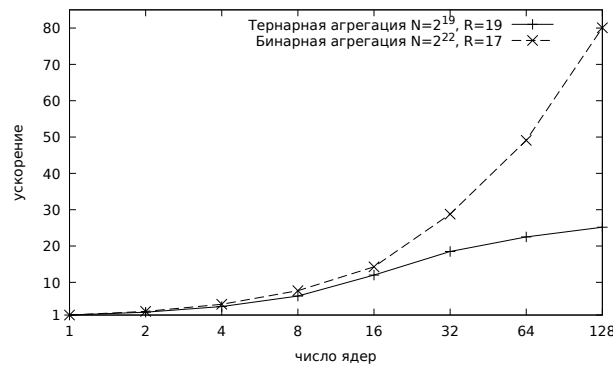


Рис. 3. Ускорения времен расчета для параллельной реализации эффективных вычислений операторов двухчастичной и трехчастичной агрегации. Соответственно 16 и 10 шагов интегрирования по времени для количества уравнений $N = 2^{22}$ и $N = 2^{19}$. Параметром R обозначен максимальный ранг используемых представлений для ядер.

В **заключении** перечисляются основные результаты работы, а также направления, в которых могут быть продолжены проведенные исследования.

Основные результаты работы

Основной результат работы: разработаны эффективные алгоритмы, снижающие сложность вычисления правой части для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского; новые алгоритмы реализованы в виде комплекса программ для численного решения рассматриваемого класса уравнений. В работе получены следующие частные результаты:

- Предложены эффективные методы организации вычислений правой части для численного решения для кинетических уравнений, допускающих множественные взаимодействия агрегатов.
- Разностный метод с использованием разработанных алгоритмов эффективных вычислений реализован в виде комплекса программ.
- Предложен способ параллелизации указанных алгоритмов.

- Проведено моделирование физического процесса агрегации при учете трехчастичных взаимодействий для задачи роста металлических наночастиц.
- Получены оценки рангов массивов кинетических коэффициентов: постоянного, обобщенного сложения, обобщенного умножения; а также эмпирического обобщения баллистического ядра на случай трехчастичных столкновений.
- Доказана теорема о корректности постановки задачи Коши многочастичной агрегации.

Разработанные алгоритмы могут быть использованы для численного решения широкого класса задач, допускающих множественные столкновения. Алгоритмы нетрудно адаптируются на случай наличия процессов фрагментации, источников и стоков частиц.

Полученные теоретические результаты и разработанный комплекс программ позволяют качественно расширить круг задач, доступных для детального изучения методами математического моделирования.

Публикации автора по теме диссертации

- [1] Стефонишин Д. А., Матвеев С. А., Смирнов А. П. и Тыртышников Е. Е. Эффективный разностный метод численного решения уравнений агрегации с учетом трехчастичных столкновений // *Вычислительные методы и программирование*, 19(3):261–269, 2018.
- [2] Стефонишин Д. А., Матвеев С. А., Смирнов А. П. и Тыртышников Е. Е. Тензорные разложения для решения уравнений математических моделей агрегации, допускающих многочастичные столкновения // *Вычислительные методы и программирование*, 19(4):390–404, 2018.
- [3] Stefonishin D. A. On the Generic Rank of Matrices Composed of Kronecker Products // *Doklady Mathematics*, 97(2):125–128, 2018.
- [4] Тыртышников Е. Е. и Стефонишин Д. А. Формулы и оценки для главного ранга тензоров // *Тезисы докладов конференции “Ломоносовские чтения”*. МАКС ПРЕСС Москва, МГУ, ВМК, 2014.

Стефонишин Даниил Александрович

**Тензорные разложения и их применение к решению систем
кинетических уравнений с учетом множественных столкновений частиц**

Автореф. дис. на соискание ученой степени канд. физ.-мат. наук

Подписано в печать __. __. _____. Заказ № _____

Формат 60×90/16. Усл. печ. л. 1. Тираж 100 экз.

Типография _____

