



Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова

Факультет вычислительной математики и кибернетики

На правах рукописи

УДК 519.642.2, 519.642.6

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»

Диссертация

на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель:

академик РАН,

доктор физико-математических наук

Тыртышников Е. Е.

Научный консультант:

кандидат физико-математических наук

Матвеев С. А.

Москва, 2018

# Оглавление

<b>Введение</b>	<b>5</b>
<b>1 Многочастичные кинетические уравнения агрегации типа уравнений Смолуховского</b>	<b>11</b>
1.1 Предположения о физических системах	11
1.2 Модель физических процессов, допускающих многочастичные столкновения	13
1.2.1 Постановка задачи	13
1.2.2 Величины, характеризующие процесс агрегации. Физически осмысленное решение задачи Коши	14
1.2.3 Аналитическое решение	15
1.3 Разностный метод решения систем уравнений, допускающих многочастичные столкновения	16
<b>2 Корректность постановки задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации с ограниченными ядрами</b>	<b>20</b>
2.1 Теорема о корректности постановки задачи Коши для уравнений многочастичной агрегации	21
2.1.1 Функциональные пространства. Формулировка теоремы о корректности задачи Коши	21
2.1.2 Свойства полилинейных форм	24
2.1.3 Единственность решения задачи Коши в классе ограниченных функций. Непрерывная зависимость решения от входных данных	26
2.1.4 Неотрицательные решения задачи Коши	27
2.1.5 Построение локального решения уравнений многочастичной агрегации	28
2.1.6 Равномерные оценки норм неотрицательного решения. Доказательство теоремы о корректности постановки задачи Коши	29
2.1.7 Класс неограниченных ядер линейного роста. Неинвариантность полилинейных форм	32

2.2	Разностная схема предиктор-корректор для уравнений многочастичной агрегации . . . . .	33
2.2.1	Усеченная задача Коши для уравнений многочастичной агрегации	33
2.2.2	Аппроксимация усеченной задачи Коши . . . . .	34
2.2.3	Оценка на шаг по времени для разностной схемы . . . . .	36
2.2.4	Сходимость решения разностной задачи к решению усеченной дифференциальной задачи . . . . .	38
2.2.5	Компактность последовательности решений усеченных задач. Сходимость к решению исходной задачи . . . . .	40
<b>3</b>	<b>Применение тензорных разложений для решения систем многочастичных уравнений типа уравнений Смолуховского</b>	<b>42</b>
3.1	Тензорные разложения . . . . .	43
3.1.1	Тензорные аппроксимации . . . . .	43
3.1.2	Каноническое разложение . . . . .	44
3.1.3	Глобальные свойства тензорного ранга . . . . .	44
3.1.4	Разложение Таккера . . . . .	47
3.1.5	ТТ-разложение . . . . .	48
3.1.6	Сводная таблица характеристик тензорных разложений . . . . .	48
3.2	Методы ускорения вычислений в разностной схеме предиктор-корректор	49
3.2.1	Операция сдвинутой итерированной свертки . . . . .	50
3.2.2	Операция итерированного умножения на вектор . . . . .	53
3.2.3	Сводная таблица сложности операций с использованием тензорных разложений . . . . .	55
3.2.4	Параллельная реализация вычислений с использованием тензорного поезда . . . . .	57
3.3	Оценки тензорных рангов для некоторых классов массивов кинетических коэффициентов . . . . .	59
3.3.1	Оценки рангов для постоянного ядра . . . . .	61
3.3.2	Оценки рангов для ядра обобщенного умножения . . . . .	61
3.3.3	Оценки рангов для ядра обобщенного сложения . . . . .	63
3.3.4	Оценки рангов для баллистического ядра и его трехчастичного обобщения . . . . .	64
<b>4</b>	<b>Численные эксперименты</b>	<b>65</b>
4.1	Описание программного комплекса для задачи многочастичной агрегации . . . . .	65
4.2	Результаты экспериментов в случае трехчастичной агрегации . . . . .	67
4.3	Результаты экспериментов в общем случае многочастичной агрегации . . . . .	72

4.4	Численное моделирование задачи катализа металлических наночастиц .	78
4.5	Масштабируемость параллельной реализации метода численного решения задачи Коши многочастичной агрегации . . . . .	83
	<b>Заключение</b>	<b>85</b>
	<b>Список используемых обозначений</b>	<b>86</b>
	<b>Список литературы</b>	<b>87</b>

# Введение

Настоящая диссертационная 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.

Математические модели процессов агрегации характеризуют взаимодействия огромного числа хаотически движущихся частиц сложной пространственно-однородной физической системы. Модель такого типа впервые была записана в виде формально бесконечной системы дифференциальных уравнений, каждое из которых отвечает за эволюцию концентрации частиц конкретного размера на единицу объёма окружающей среды. При этом принималось во внимание, что эволюция системы определяется неупругими бинарными соударениями частиц, размер которых формально не ограничен. Именно так модель была сформулирована в 1916 году Марианом Смолуховским в работе [1] в предположении, что все частицы представляют собой агрегаты, состоящие из некоторого целого количества частиц фиксированного минимального возможного в среде размера. В 1928 году дискретная модель Смолуховского была обобщена в работе [2] Гансом Мюллером до непрерывной модели, определяемой интегро-дифференциальным уравнением.

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 [3], описания процессов агрегации вещества в планетных кольцах [4], роста полимеров [5], кинетики белков-прионов [6–8] и других [9–17]. 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 [16, 18, 19], то сам вид многочастичных си-

стем 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.

Необходимо отметить, что в работе [20] были предложены эффективные методы численного решения задач Коши для систем двухчастичных уравнений типа уравнений Смолуховского посредством конечно-разностных схем. В данной работе результаты [20] обобщаются на случай множественных столкновений частиц.

**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. Также целью работы является доказательство корректности постановки рассматриваемой задачи Коши для обоснования применимости конечно-разностных методов. 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.

**Научная новизна.** В работе предложены эффективные алгоритмы организации вычислений, снижающие сложность вычисления правой части для многочастичных кинетических 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 представлено теоретическое обоснование корректности постановки задачи Коши для рассматриваемых уравнений многочастичной агрегации, обосновывающее при-

менимость конечно-разностных методов 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, в работе представлено теоретическое обоснование корректности постановки задачи Коши для уравнений многочастичной агрегации. Данный результат обосновывает применимость разностных методов для решения рассматриваемых уравнений.

**Практическая ценность** работы состоит в программной реализации разностных методов, задействующих предложенные эффективные алгоритмы 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.

**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 [21, 22] — в журналах, рекомендованных ВАК и 1 статья [23] — в журнале, индексируемом Scopus. Также опубликована 1 работа [24] в сборниках тезисов и трудов конференций.

**Личный вклад автора.**

В работе [21] 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 работе [22] автор развил идею работы [21], изложил алгоритм ускорения численной схемы предиктор-корректор при использовании тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов ГТ-разложением, разработал программную реализацию схемы с использованием алгоритма и провёл обширные вычислительные эксперименты для задачи многочастичной агрегации.

Работа [23] 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, четырех глав, заключения, списка используемых обозначений, списка литературы. Общий объем диссертационной работы составляет 92 страницы, включая 8 описаний алгоритмов, 10 рисунков, 12 таблиц и список литературы из 71 наименования.

**Содержание работы.** В первой главе излагаются предположения о рассматриваемых физических процессах. Приводится постановка задачи об эволюции системы неупруго сталкивающихся частиц, допускающих множественные взаимодействия. Описываются характеризующие систему величины, а именно полная концентрация частиц и полная масса системы. Помимо этого, приводятся аналитические решения задачи в модельных частных случаях. В связи с отсутствием известного аналитического решения в общем случае рассматриваются конечно-разностные методы решения указанной задачи. Обсуждается сложность численного решения в приведенной постановке и методы ее снижения.

Во второй главе доказываются корректность постановки задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского при ограниченных элементах массивов кинетических коэффициентов. Также приводятся утверждения о наличии свойств аппроксимации и устойчивости разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка, гарантирующие сходимость ее решения к решению задачи Коши. Данные факты обосновывают применимость конечно-разностного метода для решения рассматриваемой задачи. В главе излагаются рассуждения о необходимости ограничений на шаг по времени для разностных методов решения задачи Коши многочастичной агрегации соответственно росту кинетических коэффициентов.

В третьей главе приводятся необходимые сведения из теории малоранговых тензорных аппроксимаций. Перечисляются известные широко используемые разложения с разделенными переменными и связанные с ними понятия. Далее описываются разработанные последовательные и параллельные эффективные алгоритмы ускорения вы-

числений в разностной схеме предиктор-корректор на основе применения малоранговых тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Наконец, третья глава содержит необходимые теоретические оценки рангов канонических разложений и разложений в формате тензорного произведения для некоторых модельных физически осмысленных массивов кинетических коэффициентов. 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. Приводятся результаты численных экспериментов для модельных задач, в том числе для задачи, описывающей физический процесс роста металлических наночастиц. Производительность новых 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. В главе показывается, что разработанные алгоритмы эффективны при решении практических задач математического моделирования. Помимо этого, приводится ряд результатов моделирования реального процесса агрегации вещества.

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

**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.

# Глава 1

## Многочастичные кинетические уравнения агрегации типа уравнений Смолуховского

В данной главе излагаются предположения о рассматриваемых физических процессах агрегации вещества. Приводится постановка задачи об эволюции системы неупруго сталкивающихся частиц, допускающих множественные взаимодействия. Описываются характеризующие систему величины, а именно полная концентрация частиц и полная масса системы. Помимо этого, приводятся аналитические решения задачи в модельных частных случаях. В связи с отсутствием известного аналитического решения в общем случае рассматриваются конечно-разностные методы решения указанной задачи. Обсуждается сложность численного решения в приведенной постановке и способы ее снижения.

### 1.1 Предположения о физических системах

Неупругие взаимодействия частиц сложной физической системы лежат в основе различных природных и технологических явлений: роста полимеров [5, 14] и катализа металлических наночастиц, реакций иммунного ответа [25] и кинетики белков-прионов [6], коагуляции частиц аэрозолей в атмосфере [3, 15], возникновения микротрещин в материалах и динамики развития нелокальных связей в нейронных сетях [11], а также образования звезд [4, 16] и галактических кластеров [17]. В таких физических процессах типичная система состоит из большого числа хаотически сталкивающихся элементов, равномерно распределенных в пространственно-однородной среде. При указанных предположениях соотношения баланса неупруго соударяющихся частиц в таких системах могут быть записаны в виде кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского [1].

Наряду с процессами объединения (другими словами агрегации или коагуляции) частиц в системе в следствие их неупругих соударений могут присутствовать и другие процессы, например, дробления [5, 26–29], а также роста частиц в следствие конденсации, осаждения или аккреции между столкновениями [30–34].

В настоящей работе рассматривается дискретный вариант уравнений. Данная модель описывает ситуацию, когда все частицы (агрегаты) состоят из целого числа частиц минимального возможного в данной системе размера (мономеров). Кроме того предполагается, что в системе наличествует лишь процесс необратимой агрегации вещества, при отсутствии фрагментации частиц, а также источников и стоков. Частицы рассматриваемой физической системы определяются своим размером, иначе говоря, количеством  $k$  мономеров, из которых они состоят. В исследуемой модели под размером без ограничения общности может пониматься, например, объем или масса агрегата.

Каждое кинетическое уравнение системы описывает эволюцию во времени средней концентрации  $n_k(t)$  частиц соответствующего размера  $k$  на единицу объема вследствие процесса агрегации. При отсутствии процесса фрагментации (распада) и стоков частиц с течением времени образуются все большие и большие агрегаты, что формально означает наличие бесконечного числа уравнений в системе относительно компонент вектора концентраций

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

Несмотря на то, что некоторые авторы продвинулись в исследовании многочастичных процессов агрегации [35,36], в абсолютном большинстве известных исследований [11, 16,18,19] в системах кинетических уравнений учитываются только бинарные взаимодействия, а одновременные соударения большего числа частиц игнорируются. Последнее представляется разумным приближением, например, когда рассматриваемая физическая система обладает невысокой плотностью. Однако в реальных физических процессах могут иметь место и практически мгновенные взаимодействия сразу нескольких частиц. В частности, вклад таких взаимодействий в эволюцию системы более заметен, когда продукты множественных столкновений являются существенно более стабильными чем продукты бинарных. Другим примером необходимости учитывать множественные столкновения является увеличение вероятности многочастичных столкновений пропорционально росту площади поверхности (то есть размеру) агрегатов.

В настоящей работе исследуются физические системы, допускающие одновременные взаимодействия сразу нескольких частиц в любом количестве вплоть до некоторого заданного конечного  $D$ .

## 1.2 Модель физических процессов, допускающих многочастичные столкновения

### 1.2.1 Постановка задачи

Процессы агрегации, допускающие множественные столкновения, могут быть описаны так называемыми «многочастичными» обыкновенными дифференциальными уравнениями типа уравнений Смолуховского. Уравнения имеют следующий вид

$$\frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}](t), \quad (1.1)$$

$$\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}] \equiv \{\mathcal{P}^{(d)} + \mathcal{Q}^{(d)}\}[\mathbf{n}], \quad 2 \leq d \leq D,$$

где нелинейные операторы  $\mathcal{P}^{(d)} = [\mathcal{P}_1^{(d)}, \mathcal{P}_2^{(d)}, \dots]^T$  и  $\mathcal{Q}^{(d)} = [\mathcal{Q}_1^{(d)}, \mathcal{Q}_2^{(d)}, \dots]^T$  представлены своими компонентами

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_k^{(d)}[\mathbf{n}] &:= \frac{1}{d!} \sum_{|\mathbf{i}_d|=k} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_d}, \\ \mathcal{Q}_k^{(d)}[\mathbf{n}] &:= -\frac{n_k}{(d-1)!} \sum_{i_{d-1}>0} C_{\mathbf{i}_{d-1},k}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_{d-1}}, \\ k \in \mathbb{N}, \quad 2 \leq d \leq D. \end{aligned}$$

В данной записи подразумевается суммирование по всевозможным размерам  $i_\lambda \in \mathbb{N}$  частиц системы, то есть кратная сумма в определении  $\mathcal{Q}_k^{(d)}$  является формально бесконечной.

Указанный вид уравнений (1.1) объясняется предположением, что в физической системе допустимы все типы столкновений по количеству  $d$  участвующих в них частиц для  $2 \leq d \leq D$ . Фиксированный параметр  $D$  определяет максимальное число агрегатов, которые могут участвовать в одном взаимодействии. Таким образом столкновения для  $d > D$  считаются маловероятными и не учитываются. При  $D = 2$  рассматриваемые уравнения являются исходными двухчастичными уравнениями агрегации Смолуховского [1].

В уравнениях (1.1) компоненты  $\mathcal{P}_k^{(d)}$  и  $\mathcal{Q}_k^{(d)}$  целиком и полностью отвечают за  $d$ -частичные взаимодействия, приводящие к изменению концентрации агрегатов размера  $k$ . Величина  $\mathcal{P}_k^{(d)}$  описывает скорость или частоту образования частиц размера

$$k = |\mathbf{i}_d| \equiv i_1 + i_2 + \dots + i_d$$

посредством столкновений частиц всевозможных размеров  $i_1, i_2, \dots, i_d$ . Величина  $\mathcal{Q}_k^{(d)}$  определяет скорость (частоту), с которой агрегаты размера  $k$  исчезают за счет соуда-

рений с частицами любых других возможных в системе размеров  $i_1, i_2, \dots, i_{d-1}$ .

Значения компонент  $\mathcal{P}_k^{(d)}$  и  $\mathcal{Q}_k^{(d)}$  задаются через постоянные кинетические коэффициенты  $C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \equiv C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)}$ , характеризующие спецификой рассматриваемой физической системы. Данный факт мы, при необходимости, будем обозначать явным указанием зависимости оператора  $\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{n}] \equiv \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{c}^{(d)}; \mathbf{n}]$  (аналогично для  $\mathcal{P}^{(d)}$  и  $\mathcal{Q}^{(d)}$ ) от  $d$ -мерного массива (ядра) коэффициентов  $\mathfrak{c}^{(d)} := [C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}]$ . Отметим, что из физических соображений следуют неотрицательность коэффициентов и их симметричность относительно размеров взаимодействующих частиц

$$C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} = C_{\sigma_d(\mathbf{i}_d)}^{(d)} \geq 0, \quad 2 \leq d \leq D.$$

Равенство выше имеет место для произвольной перестановки индексов

$$\sigma_d: \{1, 2, \dots, d\} \rightarrow \{1, 2, \dots, d\}.$$

Симметрией коэффициентов объясняется наличие множителей (зависящих от  $d$ ) перед суммами в определениях компонент  $\mathcal{P}_k^{(d)}$  и  $\mathcal{Q}_k^{(d)}$ , позволяющих избежать кратного суммирования.

Для указанной выше бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1.1) может быть поставлена задача Коши при задании начального условия

$$\mathbf{n}(0) = \mathbf{n}^{(0)} \equiv [n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots]^T. \quad (1.2)$$

Ясно, что необходимо предполагать неотрицательность всех концентраций  $n_k^{(0)}$ . В следующей главе 2 излагаются соображения о необходимых требованиях на начальную функцию  $\mathbf{n}^{(0)}$  и элементы массивов  $\mathfrak{c}^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$ , при которых возможно существование физически-осмысленного решения для поставленной задачи Коши с рассматриваемыми многочастичными кинетическими уравнениями агрегации.

## 1.2.2 Величины, характеризующие процесс агрегации.

### Физически осмысленное решение задачи Коши

В качестве характеристических величин процесса агрегации, описываемого задачей Коши (1.1), (1.2), в момент времени  $t$  вводятся полная концентрация агрегатов

$$n(t) := \omega_0[\mathbf{n}](t) \equiv \sum_{k \geq 1} n_k(t),$$

и общая масса вещества рассматриваемой физической системы

$$m(t) := \omega_1[\mathbf{n}](t) \equiv \sum_{k \geq 1} k \cdot n_k(t).$$

Для системы уравнений (1.1) при  $D = 2$  известны линейные ограничения на рост кинетических коэффициентов вида

$$\sup_{i_1, i_2} \left[ C_{i_1, i_2}^{(2)} \cdot (i_1 + i_2)^{-1} \right] < +\infty,$$

гарантирующие выполнение закона сохранения массы

$$m(t) = m(0),$$

при начальных условиях из достаточно широкого класса [16]. Рассуждениями, аналогичными описанным в указанной книге, можно показать, что данное утверждение можно обобщить на случай произвольного  $D > 2$ . В этом случае для выполнения закона сохранения массы необходимо требовать линейных ограничений

$$\sup_{\mathbf{i}_d} \left[ C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot |\mathbf{i}_d|^{-1} \right] < +\infty,$$

на рост элементов каждого из массивов  $\mathfrak{C}^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$ . Однако, доказательство такого утверждения не является тривиальным и выходит за рамки настоящей работы. В главе 2 будет показано, что в общем случае системы уравнений при  $D \geq 2$  масса не обязана сохраняться, когда для коэффициентов хотя бы при одном  $2 \leq d \leq D$  наблюдается сверхлинейный рост.

**Определение 1.** *Под физически осмысленным решением задачи Коши (1.1), (1.2) на интервале  $0 \leq t \leq T$  будет пониматься вектор-функция  $\mathbf{n}(t)$ , которая является покомпонентно непрерывно-дифференцируемой, неотрицательной и удовлетворяет указанным условиям (1.1) и (1.2), а также закону сохранения массы.*

### 1.2.3 Аналитическое решение

Если в среде возможны только  $D$ -частичные столкновения, то равны нулю кинетические коэффициенты, отвечающие за иные типы столкновений. В таком случае уравнения (1.1) принимают более простой вид

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathcal{S}^{(D)}[\mathbf{n}]. \quad (1.3)$$

Аналитическое решение  $D$ -частичной задачи Коши (1.2), (1.3) известно только для кинетических коэффициентов  $C_{\mathbf{i}_D}^{(D)}$  приведенного ниже специального простого вида (кон-

стантных, аддитивных или мультипликативных) при задании определенных начальных условий [11, 36, 37]. То есть вид коэффициентов для произвольных значений мультииндекса  $\mathbf{i}_D \in \mathcal{I}^{(D)} := \{(i_1, i_2, \dots, i_D) \in \mathbb{N}^D\}$  определяется при некоторых постоянных величинах  $c, \alpha \geq 0$  одной из следующих формул

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv c, \quad C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = |\mathbf{i}_D|, \quad C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = (i_1 \cdot i_2 \cdot \dots \cdot i_D)^\alpha.$$

Например, в случае постоянных кинетических коэффициентов и так называемых монодисперсных начальных условий

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv 1; \quad n_k^{(0)} = \delta_{1,k}, \quad k \in \mathbb{N}$$

решение задачи Коши (1.2), (1.3) может быть записано посредством нижеследующих выражений через полную концентрацию  $n(t)$  вещества системы

$$n(t) = \left[ 1 + \frac{(D-1)^2}{D!} \cdot t \right]^{-(D-1)^{-1}};$$

$$n_k(t) = \frac{\Gamma(k \cdot (D-1)^{-1})}{\Gamma((D-1)^{-1}) \cdot \Gamma(\xi+1)} \cdot \left\{ n^{1-(D-1)^{-1}} \cdot (1-n)^\xi \right\}(t), \quad k = \xi(D-1) + 1;$$

$$n_k(t) \equiv 0, \quad k \neq \xi(D-1) + 1; \quad \xi \in \mathbb{N} \cup \{0\}. \quad (1.4)$$

В записи выше функция  $\Gamma(\cdot)$  представляет собой гамма-функцию Эйлера. Отметим, что тривиальный вид каждой из концентраций  $n_k$  для  $k \neq \xi(D-1) + 1$  естественным образом следует из выбора начального условия, отсутствия процесса фрагментации и наличия только  $D$ -частичных столкновений.

### 1.3 Разностный метод решения систем уравнений, допускающих многочастичные столкновения

Необходимо отметить, что свойства систем кинетических уравнений (1.1) при  $D = 2$  хорошо изучены [11, 16, 18, 19]. Эффективный конечно-разностный метод приближенного численного решения двухчастичной системы при использовании малоранговых матричных и тензорных разложений подробно обсуждался в работе [20].

Мы также отсылаем читателя к совокупности связанных исследований в терминах вычислительной сложности и использования малоранговых разложений. В их числе недавние результаты для физических систем, допускающих только бинарные взаимодействия: в применении к непрерывным моделям агрегации [38, 39], многокомпонентным процессам коагуляции [40, 41], процессам адвекции-коагуляции [42], а также дискрет-



ным уравнениям процессов агрегации и фрагментации вещества как при наличии временной зависимости [29, 43], так и в стационарном случае [44]. Наряду с разностными численными методами решения задачи Коши, распространенными для двухчастичных кинетических уравнений являются методы Монте-Карло [45–47], имеющие ряд преимуществ перед разностными.

В общем случае  $D > 2$  существенная нелинейность и, как следствие, большая сложность системы многочастичных уравнений типа уравнений Смолуховского затрудняет ее исследование и накладывает существенные ограничения на прямое применение классических вычислительных методов.

Последнее утверждение можно продемонстрировать на примере конечно-разностной схемы предиктор-корректор для задачи Коши (1.1), (1.2). Пусть параметр  $N \in \mathbb{N}$  определяет количество уравнений, задействованных при аппроксимации исходной бесконечной системы (1.1) обыкновенных дифференциальных уравнений конечной системой. При фиксированном шаге  $\Delta t > 0$  будем полагать, что величина  $n_k^{(\alpha)}$  аппроксимирует значение  $n_k(\alpha \cdot \Delta t)$ . Тогда в обозначениях

$$\mathbf{n}_N^{(\alpha)} := \left[ n_1^{(\alpha)}, n_2^{(\alpha)}, \dots, n_N^{(\alpha)} \right]^T$$

указанная разностная схема для конечной системы при  $\alpha \in \mathbb{N} \cup \{0\}$  может быть записана следующим образом

$$\begin{cases} \mathbf{n}_N^{(0)} = \left[ n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots, n_N^{(0)} \right]^T, \\ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1/2)} = \mathbf{n}_N^{(\alpha)} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)} \left[ \mathbf{n}_N^{(\alpha)} \right], \\ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1)} = \mathbf{n}_N^{(\alpha)} + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)} \left[ \mathbf{n}_N^{(\alpha+1/2)} \right]. \end{cases} \quad (1.5)$$

Здесь подразумевается, что суммы в определении оператора  $\mathcal{S}^{(d)}$  берутся по всевозможным размерам  $1 \leq i_\lambda \leq N$ , то есть кратная сумма из определения компонент  $\mathcal{Q}_k^{(d)}$  в данном случае является конечной.

Схема (1.5) имеет формальный порядок  $O((\Delta t)^2)$  аппроксимации точного решения. Основными препятствиями для ее прямого применения являются сложность лобового вычисления оператора  $\mathcal{S}^{(d)}$  на каждом шаге схемы и затраты на хранение в памяти массивов кинетических коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(d)}$ . В итоге наблюдается экспоненциальная зависимость  $O(N^D)$  формальной алгоритмической сложности выполнения шага и количества задействованных ячеек памяти от максимального допустимого количества  $D$  частиц, участвующих в одном взаимодействии.

Решением данной проблемы может служить использование малоранговых тензор-

ных аппроксимаций для массивов коэффициентов

$$\mathfrak{C}^{(d)} = \left[ C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \right], \quad 1 \leq i_\lambda \leq N, \quad 1 \leq \lambda \leq d, \quad 2 \leq d \leq D$$

и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Последний факт может быть проиллюстрирован на примере простейших одноранговых трехчастичных кинетических коэффициентов вида  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = u_{i_1} \cdot v_{i_2} \cdot w_{i_3}$  (аналогичный пример может быть приведен для любой размерности ядра  $d \geq 2$ ). В этом случае для того, чтобы получить все  $N$  компонент оператора  $\mathcal{P}^{(3)}[\mathbf{n}_N]$ , определяемых выражениями

$$\mathcal{P}_k^{(3)} = \sum_{i_1+i_2+i_3=k} C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot n_{i_3} = \sum_{i_1+i_2+i_3=k} (u_{i_1} n_{i_1}) \cdot (v_{i_2} n_{i_2}) \cdot (w_{i_3} n_{i_3}), \quad 1 \leq k \leq N,$$

нам достаточно последовательно при всех  $k$  вычислить результаты двух сдвинутых дискретных сверток

$$z_k = \sum_{j=1}^{k-1} (v_j n_j) \cdot (w_{k-j} n_{k-j}), \quad \mathcal{P}_k^{(3)} = \sum_{i=1}^{k-2} (u_i n_i) \cdot z_{k-i}, \quad 1 \leq k \leq N.$$

Указанные вычисления могут быть проведены с помощью быстрого дискретного преобразования за  $O(N \log N)$  арифметических операций [48]. Вычисление всех компонент оператора  $\mathcal{Q}^{(3)}[\mathbf{n}_N]$  с указанными коэффициентами  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}$  представляет собой еще более простую задачу и может быть произведено за  $O(N)$  операций. Заметим, что в памяти вместо самих коэффициентов достаточно хранить величины  $u_i, v_i, w_i$ , то есть всего  $O(N)$  значений.

Приведенная процедура несложно обобщается для кинетических коэффициентов более сложного вида. Например, на случай, когда элементы массива  $\mathfrak{C}^{(3)} = \left[ C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \right]$  могут быть представлены в виде

$$C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sum_{r=1}^R u_{i_1, r} \cdot v_{i_2, r} \cdot w_{i_3, r}.$$

Такое представление тензора  $\mathfrak{C}^{(3)}$  называется как каноническим разложением (также полилинейным или CP, от англ. Canonical Polyadic) ранга  $R$ . При его использовании полная арифметическая сложность вычисления всех  $N$  компонент оператора  $\mathcal{S}^{(3)}$  и необходимое для этого количество ячеек памяти составляют  $O(NR \log N)$  и  $O(NR)$ , соответственно.

Для представления ядра  $\mathfrak{C}^{(d)}$  в памяти и вычисления оператора  $\mathcal{S}^{(d)}$  могут быть также использованы и другие известные тензорные разложения. Например, разложение Таккера и ТТ-разложение (тензорный поезд, от англ. Tensor Train), для которых определяются свои собственные понятия ранга. В любом случае величина ранга ха-

рактирует количество параметров, достаточное для полного определения каждого элемента заданного тензора. Важно, что поскольку сложность вычислений на каждом шаге схемы и объем используемой для расчетов памяти напрямую зависят от малости рангов используемых тензорных представлений, то необходимо уметь строить малоранговые разложения для заданных ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$ .

Следует отметить, что построение точных разложений не является обязательным. В главе 2 будет показано, что задача Коши (1.1), (1.2) для многочастичных кинетических уравнений агрегации устойчива по начальным данным при определенных условиях на массивы кинетических коэффициентов. Последнее означает достаточность использования малоранговых тензорных аппроксимаций вместо точных разложений. Тем более, что существуют эффективные методы построения таких приближенных тензорных представлений, например, в виде тензорного поезда.

Описание упомянутых выше тензорных разложений, обзор их необходимых свойств, а равно и методов их использования для ускорения разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка подробно излагается в главе 3 настоящей работы.

## Глава 2

# Корректность постановки задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации с ограниченными ядрами

В данной главе доказывается теорема о корректности постановки задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации из главы 1. Напомним, что для  $t \geq 0$  с использованием операторов  $\mathcal{S}^{(d)}$  для  $d$ -частичной агрегации эта задача может быть записана в следующем виде

$$\begin{cases} \mathbf{n}(0) = \mathbf{n}^{(0)}, \\ \frac{d\mathbf{n}(t)}{dt} = \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{n}](t). \end{cases} \quad (2.1)$$

За основу доказательства теоремы о корректности взяты переработанные для рассматриваемого случая и соответствующим образом дополненные рассуждения из книги [16]. Структура оригинального повествования сохранена.

Также в главе приводятся утверждения о наличии свойств аппроксимации и устойчивости разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка, гарантирующие сходимость ее решения к решению задачи Коши (2.1). Указанные факты обосновывают применимость данного конечно-разностного метода для численного решения рассматриваемой задачи.

Далее мы приводим вспомогательные обозначения, которые будут необходимы только в настоящей главе.

В наших рассуждениях мы будем существенным образом использовать полилинейные формы  $\mathcal{S}^{(d)} = [\mathcal{S}_1^{(d)}, \mathcal{S}_2^{(d)}, \dots]^T$  для каждого из типов столкновений  $2 \leq d \leq D$ . Ком-

поненты таких форм для векторных аргументов  $\mathbf{f}^{(\lambda)} = [f_1^{(\lambda)}, f_2^{(\lambda)}, \dots]^T$ , при  $1 \leq \lambda \leq d$ , определяются через элементы заданного массива  $\mathfrak{C}^{(d)} = [C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}]$ , где  $\mathbf{i}_d = (i_1, i_2, \dots, i_d)$ , и имеют вид

$$\mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] := \frac{1}{d!} \left\{ \sum_{|\mathbf{i}_d|=k} - \sum_{\mathbf{i}_d > 0} \sum_{\lambda=1}^d \delta_{i_\lambda, k} \right\} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot f_{i_1}^{(1)} \cdot f_{i_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot f_{i_d}^{(d)}. \quad (2.2)$$

Нам также потребуются специальные обозначения на случай совпадения части аргументов введенных отображений. Если  $d = j_1 + j_2 + \dots + j_\lambda$ , то положим

$$\mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; j_1 \times \mathbf{f}^{(1)}, \dots, j_\lambda \times \mathbf{f}^{(\lambda)}] := \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \underbrace{\mathbf{f}^{(1)}, \dots, \mathbf{f}^{(1)}}_{j_1 \text{ штук}}, \dots, \underbrace{\mathbf{f}^{(\lambda)}, \dots, \mathbf{f}^{(\lambda)}}_{j_\lambda \text{ штук}}].$$

Без потери смысла в таких обозначениях мы будем допускать нулевые величины  $j_\xi$  и отсутствие явного указания количеств 1 и  $d$ . Таким образом, при совпадении векторных аргументов значение полилинейной формы  $\mathcal{S}^{(d)}$  совпадает с оператором  $\mathcal{S}^{(d)}$  многочастичной агрегации типа Смолуховского, введенным в главе 1.

Кроме того, в данной главе мы будем пользоваться символом  $\mathcal{A}_1 \supseteq \mathcal{A}_2$ , которым будем обозначать вложение заданных нормированных пространств  $\mathcal{A}_1 \supseteq \mathcal{A}_2$  при условии выполнения соотношения  $c \|\cdot\|_1 \leq \|\cdot\|_2$  для некоторой константы  $c \geq 0$ .

## 2.1 Теорема о корректности постановки задачи Коши для уравнений многочастичной агрегации

В настоящем разделе приводится доказательство теоремы о корректности постановки задачи Коши для уравнений многочастичной агрегации с ограниченными ядрами. Доказательство разбито на несколько частей и приводится в подразделах 2.1.1–2.1.6. В подразделе 2.1.7 предлагается контрпример для указанной теоремы при более слабых допущениях на ядра  $\mathfrak{C}^{(d)}$ .

### 2.1.1 Функциональные пространства. Формулировка теоремы о корректности задачи Коши

В настоящем разделе мы будем рассматривать нормированные пространства вещественных вектор-функций  $\mathbf{f}(t) = [f_1(t), f_2(t), \dots]^T$ , определенных на множестве

$$\mathcal{X}(T) := \{(k, t) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R} : 0 \leq t \leq T\}.$$

**Определение 2.** При заданных  $0 \leq T$ ,  $\mu < +\infty$  через  $\mathcal{F}(T, \mu)$  обозначим пространство

вектор-функций  $\mathbf{f}$ , снабженное нормой

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

**Определение 3.** Выделим подпространства  $\mathcal{F}(T, 0, \nu) \subseteq \mathcal{F}(T, 0)$ , где  $\nu \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ , с нормой

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

Необходимо отметить, что введенные пространства не являются полными, причем

$$\mathcal{F}(T, 0) \equiv \mathcal{F}(T, 0, 0) \supseteq \mathcal{F}(T, 0, 1) \supseteq \dots \supseteq \mathcal{F}(T, 0, \nu) \supseteq \mathcal{F}(T, 1) \supseteq \dots \supseteq \mathcal{F}(T, \mu).$$

**Определение 4.** Положим

$$\mathcal{F}(T) := \bigcup_{\mu > 0} \mathcal{F}(T, \mu) \subset \bigcap_{\nu \geq 0} \mathcal{F}(T, 0, \nu).$$

Обозначим через  $\mathcal{F}_+(T, 0, \nu)$ ,  $\mathcal{F}_+(T, \mu)$  и  $\mathcal{F}_+(T)$  подмножества неотрицательных функций в соответствующих пространствах  $\mathcal{F}(T, 0, \nu)$ ,  $\mathcal{F}(T, \mu)$  и  $\mathcal{F}(T)$ .

На множестве  $C(\mathcal{X}(T))$  всех непрерывных по  $t$  функций  $\mathbf{f}(t)$ , заданных на  $\mathcal{X}(T)$ , введем счетное семейство разделяющих полунорм

$$\pi_{T,\xi}(\mathbf{f}) := \max_{\substack{1 \leq k \leq \xi, \\ 0 \leq t \leq T}} |f_k(t)|, \quad \xi \in \mathbb{N}.$$

Топология равномерной сходимости на компактах из  $\mathcal{X}(T)$ , порождаемая указанным семейством полунорм, может быть метризована с использованием метрики

$$\Delta_T(\mathbf{f}, \mathbf{g}) := \sum_{\xi \geq 1} \frac{\pi_{T,\xi}(\mathbf{f} - \mathbf{g})}{2^\xi \cdot (1 + \pi_{T,\xi}(\mathbf{f} - \mathbf{g}))}.$$

С помощью последней формы определяются следующие метрики

$$\rho_{T,0,\nu}(\mathbf{f}, \mathbf{g}) := \Delta_T(\mathbf{f}, \mathbf{g}) + \|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{T,0,\nu}, \quad \rho_{T,\mu}(\mathbf{f}, \mathbf{g}) := \Delta_T(\mathbf{f}, \mathbf{g}) + \|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{T,\mu}.$$

Всюду далее нормированные пространства  $(\mathcal{F}(T, 0, \nu), \|\cdot\|_{T,0,\nu})$  и  $(\mathcal{F}(T, \mu), \|\cdot\|_{T,\mu})$  будут обозначаться символами  $\mathcal{F}(T, 0, \nu)$  и  $\mathcal{F}(T, \mu)$ . Без потери смысла такими же символами будем обозначать метрические пространства  $(\mathcal{F}(T, 0, \nu), \rho_{T,0,\nu})$  и  $(\mathcal{F}(T, \mu), \rho_{T,\mu})$ . Отметим, что указанные метрические пространства являются полными.

Введем класс ограниченных ядер. Отметим, что ядро  $\mathfrak{C}^{(d)} = [C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}]$  можно считать

массивом значений (то есть образом) дискретной функции  $C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}$ , зависящей от мульти-индекса  $\mathbf{i}_d$ .

**Определение 5.** Через  $\mathcal{B}^{(d)}$  обозначим класс вещественных функций  $\mathfrak{C}^{(d)}$ , определенных на множестве  $\mathcal{I}^{(d)} := \{\mathbf{i}_d = (i_1, i_2, \dots, i_d) \in \mathbb{N}^d\}$  и обладающих свойствами

$$\|\mathfrak{C}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}} := \sup_{\mathbf{i}_d \in \mathcal{I}^{(d)}} |C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}| < +\infty, \quad C_{\sigma_d(\mathbf{i}_d)}^{(d)} = C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}, \quad \sigma_d: \{1, 2, \dots, d\} \rightarrow \{1, 2, \dots, d\},$$

Выделим класс  $\mathcal{B}_+^{(d)} \subset \mathcal{B}^{(d)}$  поэлементно неотрицательных ядер  $\mathfrak{C}^{(d)} \geq 0$ .

Приведем формулировку основной теоремы данной главы о корректности постановки задачи Коши (2.1) для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского с ограниченными ядрами.

**Теорема 1.** При условиях  $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{B}_+^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$  и в предположении принадлежности начальной функции  $\mathbf{n}^{(0)}$  одному из классов

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

задача Коши (2.1) на множестве  $\mathcal{X}(T)$  имеет единственное в пространстве  $\mathcal{F}(T, 0)$  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 входных данных

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

при отображении указанного топологического произведения в пространство  $\mathcal{F}_+(T, 0)$  решений задачи Коши на множестве  $\mathcal{X}(T)$ .

Доказательство данной теоремы разбито на несколько вспомогательных утверждений и лемм, приведенных в подразделах 2.1.2–2.1.6.

Заметим, что если начальная функция лежит в классе  $\mathcal{F}_+(0, 0, 2)$ , то в условиях теоремы 1 для решения задачи Коши выполняется закон сохранения полной массы системы. В подразделе 2.1.7 приводится пример постановки задачи с неограниченными ядрами линейного роста, для которой закон сохранения не имеет места.

Теорема 1 имеет важное применение для численного решения рассматриваемой задачи Коши (2.1), например, при помощи разностной схемы (1.5). Предположим, что только первые  $M$  компонент начальной функции отличны от нуля. Тогда для любого  $T > 0$  всегда можно аппроксимировать исходную бесконечную систему конечной системой с числом уравнений  $N = N(M, T)$  и обеспечить выполнение сразу двух следующих требований. А именно, сохранения полной массы системы и малого отклонения решения схемы (1.5) (дополненного нулевыми компонентами) от истинного решения задачи (2.1)

по некоторой норме на всем интервале времени  $0 \leq t \leq T$ . Выполнение закона сохранения массы для конечной системы позволяет адаптивно с ростом времени  $t$  увеличивать количество задействованных уравнений без потери точности решения в процессе счета. Рост числа уравнений  $N(M, t)$  естественным образом соотносится с ростом ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$  [16].

## 2.1.2 Свойства полилинейных форм

Для начала заметим, что  $d$ -линейная форма  $\mathcal{S}^{(d)}$  наследует свойство симметричности от ядра  $\mathfrak{C}^{(d)}$ . То есть, если для любой перестановки  $\sigma_d: \{1, 2, \dots, d\} \rightarrow \{1, 2, \dots, d\}$ , и для всех возможных значений мультииндекса  $\mathbf{i}_d = (i_1, i_2, \dots, i_d)$  имеет место равенство  $C_{\sigma_d(\mathbf{i}_d)}^{(d)} = C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}$ , то выполняется тождество

$$\mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{f}^{(\sigma_d(1))}, \mathbf{f}^{(\sigma_d(2))}, \dots, \mathbf{f}^{(\sigma_d(d))}] \equiv \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}].$$

Далее, введенные в подразделе 2.1.1 пространства  $\mathcal{F}(0, 0, \nu)$ ,  $\mathcal{F}(0, \mu)$  и  $\mathcal{F}(0)$  инвариантны относительно  $d$ -линейной формы  $\mathcal{S}^{(d)}$  при фиксированном ограниченном ядре  $\mathfrak{C}^{(d)}$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \dots] &: \mathcal{F}(0, 0, \nu) \times \dots \times \mathcal{F}(0, 0, \nu) \rightarrow \mathcal{F}(0, 0, \nu), & \nu \geq 0; \\ \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \dots] &: \mathcal{F}(0, \mu) \times \dots \times \mathcal{F}(0, \mu) \rightarrow \mathcal{F}(0, \mu), & \mu \geq 0; \\ \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \dots] &: \mathcal{F}(0) \times \dots \times \mathcal{F}(0) \rightarrow \mathcal{F}(0). \end{aligned}$$

Кроме того, имеют место следующее тождество, получаемое непосредственным суммированием соотношения (2.2) с весом  $k^\xi$  для  $0 \leq \xi \leq \nu$ :

$$\begin{aligned} \sum_{k \geq 1} k^\xi \cdot \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] &= \frac{1}{d!} \sum_{\mathbf{i}_d > 0} \left( |\mathbf{i}_d|^\xi - \sum_{\lambda=1}^d i_\lambda^\xi \right) \cdot C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot f_{i_1}^{(1)} \cdot f_{i_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot f_{i_d}^{(d)}, \\ \mathbf{f}^{(\lambda)} &\in \mathcal{F}(0, 0, \nu), \quad 1 \leq \lambda \leq d; \end{aligned} \quad (2.3)$$

Следует особо выделить два физически важных частных случая указанного равенства при  $\xi = 0$  и  $\xi = 1$ :

$$\begin{aligned} \sum_{k \geq 1} \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{n}] &= -\frac{d-1}{d!} \sum_{\mathbf{i}_d > 0} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_d} \leq 0, \\ \mathfrak{C}^{(d)} &\in \mathcal{B}_+^{(d)}, \quad \mathbf{n} \in \mathcal{F}_+(0, 0); \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\sum_{k \geq 1} k \cdot \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{n}] = 0, \quad \mathbf{n} \in \mathcal{F}(0, 0, 1). \quad (2.5)$$

Первое из тождеств означает убывание полной концентрации частиц физической системы в результате процесса  $d$ -частичной агрегации. Второе тождество представляет



собой закон сохранения полной массы системы.

Для дальнейших построений нам необходимы оценки полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  в различных нормах. Пусть  $\beta := \|\mathbf{c}^{(d)}\|_{\mathcal{S}^{(d)}}$ , тогда

$$\left| \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] \right| \leq \frac{\beta}{d!} \left\{ \sum_{|\mathbf{i}_d|=k} + \sum_{\mathbf{i}_d > 0} \sum_{\lambda=1}^d \delta_{i_\lambda, k} \right\} \left| f_{i_1}^{(1)} \right| \cdot \left| f_{i_2}^{(2)} \right| \cdot \dots \cdot \left| f_{i_d}^{(d)} \right|. \quad (2.6)$$

Отсюда получаем, что на каждом отрезке  $[1, \alpha]$  для  $\alpha \in \mathbb{N}$  для некоторой константы  $c \geq 0$  имеет место неравенство

$$\begin{aligned} & \max_{0 \leq k \leq \alpha} \left| \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] \right| \leq \\ & \leq c \beta \sum_{\lambda=1}^d \left[ \sum_{i_1 > 0} \left| f_{i_1}^{(1)} \right| \cdot \dots \cdot \sum_{i_{\lambda-1} > 0} \left| f_{i_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \right| \cdot \max_{0 \leq k \leq \alpha} \left| f_k^{(\lambda)} \right| \cdot \sum_{i_{\lambda+1} > 0} \left| f_{i_{\lambda+1}}^{(\lambda+1)} \right| \cdot \dots \cdot \sum_{i_d > 0} \left| f_{i_d}^{(d)} \right| \right]. \end{aligned}$$

Далее мы будем использовать следствия из последней оценки вида

$$\begin{aligned} & \max_{0 \leq k \leq \alpha} \left| \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] \right| \leq \\ & \leq c \beta \sum_{\lambda=1}^d \left[ \|\mathbf{f}^{(1)}\|_* \cdot \dots \cdot \|\mathbf{f}^{(\lambda-1)}\|_* \cdot \max_{0 \leq k \leq \alpha} \left| f_k^{(\lambda)} \right| \cdot \|\mathbf{f}^{(\lambda+1)}\|_* \cdot \dots \cdot \|\mathbf{f}^{(d)}\|_* \right] \quad (2.7) \end{aligned}$$

в случае, когда одновременно для всех  $1 \leq \lambda \leq d$  выполнены включения  $f^{(\lambda)} \in \mathcal{F}(0, 0, \nu)$  и под нормой  $\|\cdot\|_*$  подразумевается  $\|\cdot\|_{0,0,\nu}$ ; а также когда  $f^{(\lambda)} \in \mathcal{F}(0, \mu)$  и под нормой подразумевается  $\|\cdot\|_{0,\mu}$ .

Суммируя соотношение (2.6) с весом  $1 + k + k^2 + \dots + k^\nu$  получаем

$$\begin{aligned} & \sum_{k \geq 1} \sum_{\xi=0}^{\nu} k^\xi \cdot \left| \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}] \right| \leq \\ & \leq \frac{\beta}{d!} \sum_{\mathbf{i}_d > 0} \sum_{\xi=0}^{\nu} \left( |\mathbf{i}_d|^\xi + \sum_{\lambda=1}^d i_\lambda^\xi \right) \cdot \left| f_{i_1}^{(1)} \right| \cdot \left| f_{i_2}^{(2)} \right| \cdot \dots \cdot \left| f_{i_d}^{(d)} \right|. \end{aligned}$$

Следовательно, для некоторой константы  $a(\beta, \nu) \geq 0$ , зависящей только от  $\beta$  и  $\nu$ , имеет место оценка

$$\|\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}]\|_{0,0,\nu} \leq a(\beta, \nu) \cdot \|\mathbf{f}^{(1)}\|_{0,0,\nu} \cdot \|\mathbf{f}^{(2)}\|_{0,0,\nu} \cdot \dots \cdot \|\mathbf{f}^{(d)}\|_{0,0,\nu}. \quad (2.8)$$

Аналогичным образом для некоторого  $c \geq 0$  показывается справедливость оценки

$$\|\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}^{(1)}, \mathbf{f}^{(2)}, \dots, \mathbf{f}^{(d)}]\|_{0,\mu} \leq c \beta \cdot \|\mathbf{f}^{(1)}\|_{0,\mu} \cdot \|\mathbf{f}^{(2)}\|_{0,\mu} \cdot \dots \cdot \|\mathbf{f}^{(d)}\|_{0,\mu}. \quad (2.9)$$

Отметим, что выполнение неравенств (2.8) и (2.9) для полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  означает

их непрерывность в соответствующих пространствах  $\mathcal{F}(0, 0, \nu)$  и  $\mathcal{F}(0, \mu)$ .

### 2.1.3 Единственность решения задачи Коши в классе ограниченных функций. Непрерывная зависимость решения от входных данных

В данном подразделе предполагается существование решения задачи Коши (2.1) в классе  $\mathcal{F}(T, 0)$  при входных данных  $(\mathbf{c}^{(2)}, \dots, \mathbf{c}^{(D)}; \mathbf{n}^{(0)}) \in \mathcal{B}^{(2)} \times \dots \times \mathcal{B}^{(D)} \times \mathcal{F}(0, 0)$ .

**Лемма 1.** Пусть функция  $\mathbf{n} \in \mathcal{F}(T, 0)$  является решением задачи Коши (2.1) с ядрами  $\mathbf{c}^{(d)} \in \mathcal{B}^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$  и начальной функцией  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}(0, 0)$ , тогда это решение единственно в классе  $\mathcal{F}(T, 0)$ .

*Доказательство.* Предположим противное. Тогда найдутся два решения  $\mathbf{f}$  и  $\mathbf{g}$  задачи Коши (2.1) из класса  $\mathcal{F}(T, 0)$ . При этом для  $(k, t) \in \mathcal{X}(T)$  выполняются равенства

$$f_k(t) = n_k^{(0)} + \sum_{d=2}^D \int_0^t \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}](\tau) d\tau, \quad g_k(t) = n_k^{(0)} + \sum_{d=2}^D \int_0^t \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{g}](\tau) d\tau.$$

Отметим, что для симметричного ядра  $\mathbf{c}^{(d)}$  имеет место тождество

$$\mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f}] - \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{g}] = \sum_{\lambda=1}^d \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f} - \mathbf{g}, (\lambda - 1) \times \mathbf{f}, (d - \lambda) \times \mathbf{g}].$$

Отсюда для  $(k, t) \in \mathcal{X}(T)$  получаем

$$|f_k(t) - g_k(t)| \leq \sum_{d=2}^D \sum_{\lambda=1}^d \int_0^t \left| \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{f} - \mathbf{g}, (\lambda - 1) \times \mathbf{f}, (d - \lambda) \times \mathbf{g}](\tau) \right| d\tau.$$

Просуммировав полученное неравенство по  $k$ , воспользуемся теоремой Фубини [49] и оценкой (2.9) для  $\mu = 0$ . Тогда, для некоторой константы  $c \geq 0$ , зависящей только от величин  $\|\mathbf{f}\|_{T,0}$ ,  $\|\mathbf{g}\|_{T,0}$  и  $\|\mathbf{c}^{(\lambda)}\|_{\mathcal{B}^{(\lambda)}}$  для  $1 \leq \lambda \leq d$ , имеем

$$\|\mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t)\|_{0,0} \leq c \int_0^t \|\mathbf{f}(\tau) - \mathbf{g}(\tau)\|_{0,0} d\tau \leq ct \cdot \|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{t,0} \quad 0 \leq t \leq T.$$

Следовательно, справедлива цепочка неравенств

$$\|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{\tau,0} \equiv \sup_{0 \leq t \leq \tau} \|\mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t)\|_{0,0} \leq \sup_{0 \leq t \leq \tau} ct \cdot \|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{t,0} \leq c\tau \cdot \|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{\tau,0},$$

откуда при  $\tau < 1/c$  в силу непрерывности функций  $\mathbf{f}(t)$  и  $\mathbf{g}(t)$  получаем их совпадение на интервале  $0 \leq t \leq \tau$ . Последовательно повторяя описанную выше процедуру

при  $\tau \leq t \leq 2\tau$ ,  $2\tau \leq t \leq 3\tau$  и т. д., получаем совпадение функций  $\mathbf{f}$  и  $\mathbf{g}$  всюду на  $\mathcal{X}(T)$ .  
Лемма доказана.  $\square$

**Лемма 2.** Пусть функции  $\mathbf{f}, \mathbf{g} \in \mathcal{F}(T, 0)$  являются решениями задачи Коши (2.1), соответствующими входным данным  $(\mathfrak{A}^{(2)}, \dots, \mathfrak{A}^{(D)}; \mathbf{f}^{(0)})$  и  $(\mathfrak{B}^{(2)}, \dots, \mathfrak{B}^{(D)}; \mathbf{g}^{(0)})$  из пространства  $\mathcal{B}^{(2)} \times \dots \times \mathcal{B}^{(D)} \times \mathcal{F}(0, 0)$ , причем

$$\|\mathfrak{A}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}}, \|\mathfrak{B}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \leq \beta < +\infty, \quad 2 \leq d \leq D, \quad \|\mathbf{f}\|_{T,0}, \|\mathbf{g}\|_{T,0} \leq \gamma < +\infty.$$

Тогда можно указать константу  $a = a(T, \beta, \gamma) > 0$ , для которой справедливо следующее неравенство

$$\|\mathbf{f} - \mathbf{g}\|_{T,0} \leq a \left[ \|\mathbf{f}^{(0)} - \mathbf{g}^{(0)}\|_{0,0} + \sum_{d=2}^D \|\mathfrak{A}^{(d)} - \mathfrak{B}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \right].$$

*Доказательство.* По аналогии с рассуждениями леммы 1 из тождества

$$\begin{aligned} f_k(t) - g_k(t) &= f_k^{(0)} - g_k^{(0)} + \\ &+ \sum_{d=2}^D \int_0^t \left[ \sum_{\lambda=1}^d \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{B}^{(d)}; \mathbf{f} - \mathbf{g}, (\lambda - 1) \times \mathbf{f}, (d - \lambda) \times \mathbf{g}] + \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{A}^{(d)} - \mathfrak{B}^{(d)}; \mathbf{f}] \right](\tau) d\tau, \end{aligned}$$

для  $c = c(\beta, \gamma)$  можно получить следующую оценку

$$\|\mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t)\|_{0,0} \leq \|\mathbf{f}^{(0)} - \mathbf{g}^{(0)}\|_{0,0} + c \int_0^t \|\mathbf{f}(\tau) - \mathbf{g}(\tau)\|_{0,0} d\tau + T \sum_{d=2}^D \|\mathbf{f}\|_{T,0}^d \cdot \|\mathfrak{A}^{(d)} - \mathfrak{B}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}}.$$

Отсюда при помощи неравенства Гронуолла-Беллмана [50] имеем

$$\|\mathbf{f}(t) - \mathbf{g}(t)\|_{0,0} \leq \left[ \|\mathbf{f}^{(0)} - \mathbf{g}^{(0)}\|_{0,0} + T \sum_{d=2}^D \|\mathbf{f}\|_{T,0}^d \cdot \|\mathfrak{A}^{(d)} - \mathfrak{B}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \right] \cdot e^{ct}.$$

Откуда следует желаемая оценка при  $a := (1 + T\gamma^D) \cdot e^{cT}$ . Лемма доказана.  $\square$

#### 2.1.4 Неотрицательные решения задачи Коши

**Лемма 3.** Пусть функция  $\mathbf{n} \in \mathcal{F}(T, 0)$  является решением задачи Коши (2.1) с ядрами  $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{B}_+^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$  и начальной функцией  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}_+(0, 0)$ , тогда  $\mathbf{n} \in \mathcal{F}_+(T, 0)$ .

*Доказательство.* Докажем утверждение леммы индукцией по  $k$ . Положим

$$\mathcal{H}_k(t) := - \sum_{d=2}^D \frac{1}{(d-1)!} \sum_{\mathbf{i}_{d-1} > 0} C_{\mathbf{i}_{d-1}, k}^{(d)} \cdot \{n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_{d-1}}\}(t), \quad \mathcal{G}_k(t) := \int_0^t \mathcal{H}_k(\tau) d\tau.$$

Таким образом, имеет место равенство

$$\frac{dn_k(t)}{dt} = \mathcal{P}_k(t) + n_k(t) \cdot \mathcal{H}_k(t), \quad (k, t) \in \mathcal{X}(T).$$

Отсюда, пользуясь леммой Гронуолла-Беллмана, получаем соотношение

$$n_k(t) = \int_0^t [e^{\mathcal{G}_k(t) - \mathcal{G}_k(\tau)} \cdot \mathcal{P}_k(\tau)] d\tau + n_k^{(0)} \cdot e^{\mathcal{G}_k(t)}, \quad (k, t) \in \mathcal{X}(T).$$

Из последнего тождества при  $k = 1$  и условия леммы следует справедливость базы индукции, т. е.  $n_1(t) \geq 0$  для  $0 \leq t \leq T$ , поскольку  $\mathcal{P}_1(t) \equiv 0$ . Остается заметить, что величина  $\mathcal{P}_k(t)$  для  $k > 1$  по построению определяется как взвешенная сумма произведений величин  $n_\lambda(t)$  для  $1 \leq \lambda \leq k - 1$  с неотрицательными весами. Последнее замечание обосновывает шаг индукции.  $\square$

## 2.1.5 Построение локального решения уравнений многочастичной агрегации

**Лемма 4.** При условиях  $\mathbf{c}^{(d)} \in \mathcal{B}^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$  и в предположении принадлежности начальной функции  $\mathbf{n}^{(0)}$  одному из классов

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

можно указать такое число  $\varepsilon > 0$ , что на каждом множестве  $\mathcal{X}(t)$  для  $0 < t < \varepsilon$  существует решение задачи Коши (2.1) из класса  $\mathcal{F}(t, 0, \nu)$  в случае (i) и из класса  $\mathcal{F}(t, \mu)$  в случае (ii). В каждом из случаев это решение является покомпонентно аналитическим по  $t$ .

*Доказательство.* Приведем доказательство леммы для случая (i), доказательство случая (ii) аналогично. Решение рассматриваемой задачи Коши будем строить в виде формального ряда

$$\mathbf{n}(t) := \sum_{\xi \geq 0} t^\xi \cdot \mathbf{a}^{(\xi)}, \quad \mathbf{a}^{(\xi)} := [a_1^{(\xi)}, a_2^{(\xi)}, \dots]. \quad (2.10)$$

Формально подставляя указанный ряд в равенства (2.1), получаем покомпонентные рекуррентные соотношения для коэффициентов  $\mathbf{a}^{(\xi)}$ :

$$\begin{cases} \mathbf{a}^{(0)} = \mathbf{n}^{(0)}, \\ \mathbf{a}^{(\xi+1)} = \frac{1}{\xi+1} \sum_{d=2}^D \sum_{|\mathbf{j}_d|=\xi} \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}^{(d)}; \mathbf{a}^{(j_1)}, \mathbf{a}^{(j_2)}, \dots, \mathbf{a}^{(j_d)}], \end{cases} \quad \xi \in \mathbb{N} \cup \{0\}. \quad (2.11)$$

Воспользовавшись инвариантностью полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  относительно пространства  $\mathcal{F}(0, 0, \nu)$  при фиксированном ядре  $\mathfrak{C}^{(d)}$ , индукцией по  $\xi$  получаем, что

$$\mathbf{a}^{(\xi)} \in \mathcal{F}(0, 0, \nu).$$

Введем обозначения

$$a_\xi := \|\mathbf{a}^{(\xi)}\|_{0,0,\nu}, \quad b_{\alpha,\xi} := \max_{1 \leq k \leq \alpha} |a_k^{(\xi)}|, \quad \alpha \in \mathbb{N}.$$

Из соотношений (2.7) и (2.8) для некоторого числа  $a(\beta, \nu) \geq 0$  следуют оценки

$$a_{\xi+1} \leq \frac{a(\beta, \nu)}{\xi + 1} \sum_{d=2}^D \sum_{|\mathbf{j}_d|=\xi} a_{j_1} \cdot a_{j_2} \cdot \dots \cdot a_{j_d}, \quad b_{\alpha,\xi+1} \leq \frac{a(\beta, \nu)}{\xi + 1} \sum_{d=2}^D \sum_{|\mathbf{j}_d|=\xi} a_{j_1} \cdot a_{j_2} \cdot \dots \cdot a_{j_{d-1}} \cdot b_{\alpha,j_d}.$$

Следовательно, индукцией по  $\xi$  можно показать, что

$$a_\xi \leq a_0 \cdot \zeta^\xi, \quad b_{\alpha,\xi} \leq b_{\alpha,0} \cdot \zeta^\xi, \quad \zeta := a(\beta, \nu) \cdot a_0 \cdot (1 + a_0 + \dots + a_0^{D-2}).$$

Пусть  $0 < t < 1/\zeta =: \varepsilon$ . Отметим, что частичные суммы ряда (2.10) принадлежат пространству  $\mathcal{F}(t, 0, \nu)$ , когда  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}(0, 0, \nu)$ . В силу указанных выше оценок и полноты метрического пространства  $\mathcal{F}(t, 0, \nu)$  последовательность частичных сумм ряда (2.10) сходится по метрике  $\rho_{t,0,\nu}$  к некоторой функции  $\mathbf{n} \in \mathcal{F}(t, 0, \nu)$ . По свойству непрерывности полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  при подстановке ряда (2.10) в правую часть уравнения (2.1) и учете соотношений (2.11) получаем

$$\begin{aligned} \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{n}] &= \sum_{d=2}^D \sum_{|\mathbf{j}_d| \geq 0} t^{|\mathbf{j}_d|} \cdot \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{a}^{(j_1)}, \mathbf{a}^{(j_2)}, \dots, \mathbf{a}^{(j_d)}] = \\ &= \sum_{\xi \geq 0} t^\xi \cdot \sum_{d=2}^D \sum_{|\mathbf{j}_d|=\xi} \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{a}^{(j_1)}, \mathbf{a}^{(j_2)}, \dots, \mathbf{a}^{(j_d)}] = \sum_{\xi \geq 0} (\xi + 1) \cdot t^\xi \cdot \mathbf{a}^{(\xi+1)} = \frac{d\mathbf{n}}{dt}. \end{aligned}$$

Из (2.11) также следует справедливость равенства  $\mathbf{n}(0) = \mathbf{n}^{(0)}$ . Следовательно, функция  $\mathbf{n}$  является решением задачи Коши (2.1).  $\square$

## 2.1.6 Равномерные оценки норм неотрицательного решения.

### Доказательство теоремы о корректности постановки задачи Коши

**Лемма 5.** *Предположим, что  $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{B}_+^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$ , а функция  $\mathbf{n}$  определена и непрерывна на множестве  $\mathcal{X}(t)$  для любого  $0 < t < T$ . Причем указанная функция является решением уравнения многочастичной агрегации из (2.1) из класса  $\mathcal{F}_+(t, 0, \nu)$*

при каждом указанном  $t$ . Тогда справедливо неравенство

$$\sup_{0 < t < T} \|\mathbf{n}\|_{t,0,\nu} < +\infty.$$

*Доказательство.* Поскольку функция  $\mathbf{n}$  является решением уравнения многочастичной агрегации, то в области  $\mathcal{X}(T)$  справедливо тождество

$$n_k(t) = n_k^{(0)} + \sum_{d=2}^D \int_0^t \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}^{(d)}; \mathbf{n}](\tau) d\tau.$$

Просуммировав указанное соотношение с весами  $k^\xi$  для  $0 \leq \xi \leq \nu$  и воспользовавшись теоремой Фубини и тождеством (2.3), получаем

$$\omega_\xi[\mathbf{n}](t) = \omega_\xi[\mathbf{n}^{(0)}] + \sum_{d=2}^D \frac{1}{d!} \int_0^t \left[ \sum_{\mathbf{i}_d > 0} \left( |\mathbf{i}_d|^\xi - \sum_{\lambda=1}^d i_{\lambda}^\xi \right) \cdot C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot n_{i_1} \cdot n_{i_2} \cdot \dots \cdot n_{i_d} \right](\tau) d\tau.$$

В силу неотрицательности ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$  и функции  $\mathbf{n}$ , а также выполнения ограничений  $\|\mathfrak{C}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \leq \beta < +\infty$  для всех  $2 \leq d \leq D$ , следующие соотношения справедливы для некоторой константы  $c(\beta, \xi) \geq 0$ :

$$\omega_0[\mathbf{n}](t) \leq \omega_0[\mathbf{n}^{(0)}], \quad \omega_1[\mathbf{n}](t) \equiv \omega_1[\mathbf{n}^{(0)}], \quad (2.12)$$

$$\omega_\xi[\mathbf{n}](t) \leq \omega_\xi[\mathbf{n}^{(0)}] + c(\beta, \xi) \sum_{d=2}^D \sum_{\substack{|\mathbf{j}_d|=\xi, \\ \mathbf{j}_d < \xi}} \int_0^t \{\omega_{j_1} \cdot \omega_{j_2} \cdot \dots \cdot \omega_{j_d}\}[\mathbf{n}](\tau) d\tau, \quad \xi \geq 2.$$

Здесь под символом  $\mathbf{j}_d < \xi$  подразумевается выполнение покомпонентного неравенства  $j_\lambda < \xi$  для всех  $1 \leq \lambda \leq d$ . Индукцией по  $0 \leq \xi \leq \nu$  устанавливается, что

$$\sup_{0 \leq t < T} \omega_\xi[\mathbf{n}](t) < +\infty.$$

В силу неотрицательности функции  $\mathbf{n}$  имеет место равенство

$$\|\mathbf{n}\|_{t,0,\nu} = \sup_{0 \leq \tau \leq t} \sum_{\xi=0}^{\nu} \omega_\xi[\mathbf{n}](\tau).$$

Таким образом, равномерные по  $0 \leq t < T$  оценки моментов  $\omega_\xi[\mathbf{n}](t)$  гарантируют справедливость утверждения леммы.  $\square$

*Доказательство теоремы 1.* Пусть  $\|\mathfrak{C}^{(d)}\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \leq \beta < +\infty$  для всех  $2 \leq d \leq D$ .

(i) Сначала рассмотрим случай  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}_+(0, 0, \nu)$ . В силу лемм 1, 3 и 4 в каждой области  $\mathcal{X}(t)$  для  $0 < t < \varepsilon$  существует решение  $\mathbf{n}$  задачи Коши (2.1) из класса  $\mathcal{F}_+(t, 0, \nu)$ , единственное в  $\mathcal{F}(t, 0)$ . Более того, в силу леммы 5 для указанного решения справед-

ливо неравенство

$$a := \sup_{0 < t < \varepsilon} \|\mathbf{n}\|_{t,0,\nu} < +\infty.$$

Выберем точку  $t_1$  достаточно близко к правому краю интервала  $[0, \varepsilon)$ . Обозначая через  $\mathbf{n}^{(1)} := \mathbf{n}(t_1)$  новую начальную функцию, построим в правой полукрестности точки  $t_1$  решение уравнения многочастичной агрегации из (2.1) в виде формального ряда по степеням  $(t - t_1)$ , аналогично ряду (2.10). По аналогии с рассуждениями леммы 5 при учете оценок из леммы 4 можно получить, что покомпонентная сходимость такого ряда вне зависимости от выбора  $t_1$  заведомо гарантируется в круге

$$|t - t_1| < [a(\beta, \nu) \cdot a \cdot (1 + a + \dots + a^{D-2})]^{-1}.$$

То есть за счет выбора точки  $t_1$  можно продолжить решение за границу интервала  $[0, \varepsilon)$ . Последовательно повторяя указанную процедуру, убеждаемся в существовании решения  $\mathbf{n}$  задачи Коши для любого интервала  $0 \leq t \leq T$ , где  $T > 0$ .

(ii) Перейдем к рассмотрению случая  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}_+(0)$ . Всегда можно указать такое число  $\mu > 0$ , для которого  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}_+(0, \mu)$ . Отсюда в силу лемм 1, 3 и 4 в области  $\mathcal{X}(t)$  для  $0 < t < \varepsilon(\mu)$  существует и единственно решение  $\mathbf{n} \in \mathcal{F}_+(t, \mu)$  задачи Коши (2.1). Из теоремы Леви [49] и неравенства из (2.12) получаем следующие соотношения

$$\|\mathbf{n}(t)\|_{0,\mu} = \sum_{k \geq 1} e^{\mu k} \cdot n_k(t) = \sum_{\xi \geq 0} \frac{\mu^\xi}{\xi!} \sum_{k \geq 1} k^\xi \cdot n_k(t) \leq \omega_0[\mathbf{n}^{(0)}] + \sum_{\xi \geq 1} \frac{\mu^\xi}{\xi!} \cdot \omega_\xi[\mathbf{n}](t). \quad (2.13)$$

Отметим, что  $\|\mathbf{n}(t)\|_{0,\mu_0} \leq \|\mathbf{n}(t)\|_{0,\mu}$  для любого  $0 < \mu_0 < \mu$  при всех  $0 < t < \varepsilon(\mu)$ , откуда следует, что неравенство (2.13) имеет место при замене  $\mu$  на любое  $\mu_0$ . Выберем число  $\mu_0 > 0$  достаточно малым, чтобы обеспечить справедливость неравенства  $\|\mathbf{n}^{(0)}\|_{0,\mu_0} \leq 2\omega_0[\mathbf{n}^{(0)}] =: a$ . При этом из пункта (ii) леммы 4 следует возможность указать константу  $c = c(\beta, \mu) \geq 0$ , для которой покомпонентная сходимость ряда (2.10) заведомо гарантируется в круге  $|t| < \varepsilon$  при

$$\varepsilon := [c \cdot a \cdot (1 + a + \dots + a^{D-2})]^{-1}.$$

Положим  $t_1 := \varepsilon/2$  и  $\mathbf{n}^{(1)} := \mathbf{n}(t_1)$ . Отметим, что для любого  $0 < \mu_1 < \mu_0$  в силу вложений из подраздела 2.1.1 имеет место включение

$$\mathbf{n}^{(1)} \in \mathcal{F}_+(0, \mu_0) \sqsubseteq \mathcal{F}_+(0, \mu_1).$$

При достаточно малом  $\mu_1$  справедливо неравенство  $\|\mathbf{n}^{(1)}\|_{0,\mu_1} \leq 2\omega_0[\mathbf{n}^{(0)}]$ . Принимая функцию  $\mathbf{n}^{(1)}$  за новую начальную, можно построить в окрестности точки  $t_1$  решение

уравнения многочастичной агрегации из (2.1) в виде ряда по степеням  $(t - t_1)$ , сходимость которого гарантируется в круге  $|t - t_1| < \varepsilon$ . Следовательно, нам удалось продолжить решение задачи Коши на интервал  $0 \leq t < 3\varepsilon/2$ . Повторяя указанную процедуру последовательно для точек  $t_\lambda := \lambda\varepsilon/2$  при  $\lambda \in \mathbb{N}$ , убеждаемся в существовании решения на интервале  $0 \leq t \leq T$  для  $T > 0$ .

(iii) Утверждения теоремы о единственности, непрерывной зависимости от входных данных и неотрицательности построенного решения в каждом из случаев (i) и (ii) на всем интервале  $0 \leq t \leq T$  следует из лемм 1, 2 и 3, соответственно.  $\square$

## 2.1.7 Класс неограниченных ядер линейного роста. Неинвариантность полилинейных форм

Область применимости теоремы 1 можно расширить на случай определенного ниже класса неограниченных ядер, что однако требует значительно более сложных рассуждений и выходит за рамки настоящей работы.

**Определение 6.** Через  $\mathcal{L}^{(d)}$  обозначим класс вещественных функций  $\mathfrak{C}^{(d)}$ , определенных на множестве  $\mathcal{J}^{(d)} := \{\mathbf{i}_d = (i_1, i_2, \dots, i_d) \in \mathbb{N}^d\}$  и обладающих свойствами

$$C_{\sigma_d(\mathbf{i}_d)}^{(d)} = C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \geq 0, \quad \sigma_d: \{1, 2, \dots, d\} \rightarrow \{1, 2, \dots, d\},$$

$$\|\mathfrak{C}^{(d)}\|_{\mathcal{L}^{(d)}} := \sup_{\mathbf{i}_d \in \mathcal{J}^{(d)}} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \cdot |\mathbf{i}_d|^{-1} < +\infty,$$

Важно отметить, что область определения полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  с соответствующими ядрами  $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{L}^{(d)}$  в общем случае уже, чем с ядрами из пространства  $\mathcal{B}^{(d)}$ . Именно, пространства  $\mathcal{F}(0, 0, \nu)$  для  $\nu \in \mathbb{N}$ , вообще говоря, не являются инвариантными относительно форм  $\mathcal{S}^{(d)}$ , когда  $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{L}^{(d)} \setminus \mathcal{B}^{(d)}$ . В последнем можно убедиться, взяв аддитивное ядро с элементами  $A_{\mathbf{i}_d}^{(d)} := |\mathbf{i}_d|$  и вектор  $\mathbf{f} = [f_1, f_2, \dots]^T$ , подчиняющийся условиям

$$f_k = 0, \quad k \neq d\xi + 1, \quad \xi \in \mathbb{N} \cup \{0\}; \quad \mathbf{f} \in \mathcal{F}_+(0, 0, 1) \setminus \mathcal{F}(0, 0, 2).$$

Тогда в силу вида ядра  $\mathfrak{A}^{(d)} = [A_{\mathbf{i}_d}^{(d)}]$  имеют место соотношения

$$\mathcal{P}_k^{(d)}[\mathfrak{A}^{(d)}; \mathbf{f}] = \frac{1}{d!} \sum_{|\mathbf{i}_d|=k} k \cdot f_{i_1} \cdot f_{i_2} \cdot \dots \cdot f_{i_d} \geq \frac{f_1^{d-1}}{d!} \cdot (k - d + 1) \cdot f_{k-d+1}, \quad k \geq d;$$

$$-\mathcal{Q}_k^{(d)}[\mathfrak{A}^{(d)}; \mathbf{f}] = \frac{f_k}{(d-1)!} \sum_{|\mathbf{i}_{d-1}| > 0} (|\mathbf{i}_{d-1}| + k) \cdot f_{i_1} \cdot f_{i_2} \cdot \dots \cdot f_{i_{d-1}} =$$

$$= \frac{\{\omega_0^{d-2} \cdot \omega_1\}[\mathbf{f}]}{(d-2)!} \cdot f_k + \frac{\omega_0^{d-1}[\mathbf{f}]}{(d-1)!} \cdot k f_k, \quad k \in \mathbb{N}.$$



Более того, в силу вида функции  $\mathbf{f}$  выполнены равенства

$$\mathcal{P}_k^{(d)}[\mathfrak{A}^{(d)}; \mathbf{f}] = 0, \quad \mathcal{Q}_{k+1}^{(d)}[\mathfrak{A}^{(d)}; \mathbf{f}] = 0, \quad k \neq d\xi, \quad \xi \in \mathbb{N}.$$

Отсюда непосредственно следует, что

$$\mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{A}^{(d)}; \mathbf{f}] \notin \mathcal{F}(0, 0, 1).$$

Последнее означает, что для рассматриваемого ядра не выполняется закон сохранения массы.

## 2.2 Разностная схема предиктор-корректор для уравнений многочастичной агрегации

В настоящем разделе будем предполагать, что все ядра  $\mathfrak{C}^{(d)}$  при  $2 \leq d \leq D$  и начальная функция  $\mathbf{n}^{(0)}$  для задачи Коши (2.1) удовлетворяют соответствующим включениям  $\mathfrak{C}^{(d)} \in \mathcal{B}_+^{(d)}$  и  $\mathbf{n}^{(0)} \in \mathcal{F}_+(0, 0)$ . В данных предположениях будем рассматривать вопрос о сходимости решения разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка к решению задачи Коши (2.1).

Далее в разделе при заданном  $N$  для вектора  $\mathbf{f}_N \in \mathbb{R}^N$  будем использовать нижеследующую норму по аналогии с нормой  $\|\cdot\|_{0,0}$  для вектора  $\mathbf{f}$  со счетным числом компонент:

$$\|\mathbf{f}_N\|_{0,0} := \sum_{k=1}^N |f_k|.$$

### 2.2.1 Усеченная задача Коши для уравнений многочастичной агрегации

Для заданного параметра  $N \in \mathbb{N}$  рассмотрим следующую вспомогательную усеченную задачу Коши, получаемую из исходной задачи (2.1) аппроксимацией бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений конечной при действии первых  $N$  уравнений:

$$\begin{cases} \mathbf{n}^{(N)}(0) = \mathbf{n}^{(N,0)} := [n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots, n_N^{(0)}, 0, \dots]^T, \\ \frac{d\mathbf{n}^{(N)}(t)}{dt} = \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{n}^{(N)}](t). \end{cases} \quad (2.14)$$

Здесь усеченные ядра  $\mathfrak{C}_N^{(d)} := [B_{\mathbf{i}_d}^{(d)}]$  определяются через элементы исходных ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$  по правилу

$$B_{\mathbf{i}_d}^{(d)} := \begin{cases} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)}, & \mathbf{i}_d \in \mathcal{I}_N^{(d)}, \\ 0, & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$\mathcal{I}_N^{(d)} := \{\mathbf{i}_d = (i_1, i_2, \dots, i_d) \in \mathbb{N}^d: 1 \leq i_\lambda \leq N, 1 \leq \lambda \leq d\}.$$

**Лемма 6.** При любом фиксированном числе  $N \in \mathbb{N}$  для  $0 \leq t \leq T$  усеченная задача Коши (2.14) имеет покомпонентно ограниченное неотрицательное решение  $\mathbf{n}^{(N)}(t)$ , для которого выполнены равномерные оценки

$$\|\mathbf{n}^{(N)}\|_{T,0} \leq \|\mathbf{n}^{(0)}\|_{0,0}.$$

*Доказательство.* Доказательство настоящей леммы дословно повторяет доказательство теоремы 1. Указанная оценка является аналогом неравенства (2.12).  $\square$

## 2.2.2 Аппроксимация усеченной задачи Коши

Предположим, что зафиксированы количество используемых уравнений  $N \in \mathbb{N}$ , требуемое время расчета  $T > 0$  и величина шага  $\Delta t > 0$ . Считая, что  $0 \leq \alpha \leq \lceil T/\Delta t \rceil =: A$  и  $\alpha \in \mathbb{Z}$ , рассмотрим разностную схему предиктор-корректор для задачи Коши (2.14) следующего вида

$$\begin{cases} \mathbf{m}_N^{(0)} = \mathbf{n}_N^{(0)} \equiv [n_1^{(0)}, n_2^{(0)}, \dots, n_N^{(0)}]^T, \\ \mathbf{m}_N^{(\alpha+1/2)} = \mathbf{m}_N^{(\alpha)} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\alpha)}], \\ \mathbf{m}_N^{(\alpha+1)} = \mathbf{m}_N^{(\alpha)} + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\alpha+1/2)}]. \end{cases} \quad (2.15)$$

В данной записи подразумевается, что усеченный оператор  $\mathcal{S}^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{f}_N] \in \mathbb{R}^N$  для аргумента  $\mathbf{f}_N \equiv [f_1, f_2, \dots, f_N]^T$  по определению имеет компоненты вида

$$\mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{f}_N] := \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; [f_1, f_2, \dots, f_N, 0, \dots]^T].$$

По аналогии задаются значения усеченных полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$ .

Определим множество пар

$$\mathcal{D} \equiv \mathcal{D}[N, A] := \{(k, \alpha) \in \mathbb{Z}^2: 1 \leq k \leq N, 0 \leq \alpha \leq A\}.$$

Полагая  $\mathbf{M}_{\mathcal{D}} := [\mathbf{m}_N^{(0)}, \mathbf{m}_N^{(1)}, \dots, \mathbf{m}_N^{(A)}] \in \mathbb{R}^{N \times (A+1)}$ , введем следующие обозначения

$$\mathcal{L}[\mathbf{n}^{(N)}] := \left( \mathbf{n}^{(N)}(0), \frac{d\mathbf{n}^{(N)}}{dt} - \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}_N^{(d)}; \mathbf{n}^{(N)}] \right), \quad \mathbf{u}^{(N,0)} := (\mathbf{n}^{(N,0)}, \mathbf{0});$$

$$\mathcal{L}[\mathbf{M}_{\mathcal{D}}] := [\mathbf{m}_N^{(0)}, \mathbf{S}[\mathbf{M}_{\mathcal{D}}]], \quad \mathbf{U}_{\mathcal{D}}^{(0)} := [\mathbf{n}_N^{(0)}, \mathbf{O}]; \quad \mathbf{S}[\mathbf{M}_{\mathcal{D}}] := [\mathbf{s}_N^{(1)}, \mathbf{s}_N^{(2)}, \dots, \mathbf{s}_N^{(A)}] \in \mathbb{R}^{N \times A},$$

$$\mathbf{s}_N^{(\alpha)}[\mathbf{M}_{\mathcal{D}}] := \frac{1}{\Delta t} \cdot [\mathbf{m}_N^{(\alpha)} - \mathbf{m}_N^{(\alpha-1)}] - \sum_{d=2}^D \mathcal{S}^{(d)}[\mathbf{c}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\alpha-1/2)}], \quad 1 \leq \alpha \leq A.$$

В новых обозначениях перепишем усеченную задачу Коши (2.14) и соответствующую ей разностную схему (2.15):

$$\mathcal{L}[\mathbf{n}^{(N)}] = \mathbf{u}^{(N,0)}, \quad (2.16)$$

$$\mathcal{L}[\mathbf{M}_{\mathcal{D}}] = \mathbf{U}_{\mathcal{D}}^{(0)}. \quad (2.17)$$

Ниже мы приводим определения для области определения  $\mathcal{M}(\mathcal{D})$  и области значений  $\mathcal{U}(\mathcal{D})$  разностного оператора  $\mathcal{L}$ .

**Определение 7.** Обозначим через  $\mathcal{M}(\mathcal{D})$  пространство матриц (сеточных функций) вида  $\mathbf{F}_{\mathcal{D}} = [F_k^{(\alpha)}] \in \mathbb{R}^{N \times (A+1)}$  с нормой

$$\|\mathbf{F}_{\mathcal{D}}\|_{\mathcal{M}(\mathcal{D})} := \max_{(k,\alpha) \in \mathcal{D}} |F_k^{(\alpha)}|.$$

Определим также подпространство  $\mathcal{M}_+(\mathcal{D}) \subset \mathcal{M}(\mathcal{D})$  поэлементно неотрицательных функций  $\mathbf{F}_{\mathcal{D}} \geq 0$ .

**Определение 8.** Через  $\mathcal{U}(\mathcal{D})$  обозначим линейное пространство матриц следующего вида, снабженное указанной ниже нормой  $\|\cdot\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})}$ :

$$\mathbf{U}_{\mathcal{D}} := [\mathbf{f}_N, \mathbf{S}], \quad \mathbf{f}_N = [f_1, f_2, \dots, f_N]^T, \quad \mathbf{S} = [s_k^{(\alpha)}] \in \mathbb{R}^{N \times A};$$

$$\|\mathbf{U}\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})} := \max_{1 \leq k \leq N} |f_k| + \max_{\substack{1 \leq k \leq N, \\ 1 \leq \alpha \leq A}} |s_k^{(\alpha)}|.$$

Кроме того введем множество  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D}) \subseteq \mathcal{L}[\mathcal{M}_+(\mathcal{D})] \subset \mathcal{U}(\mathcal{D})$  покомпонентно неотрицательных функций, являющееся подмножеством образа разностного оператора  $\mathcal{L}$ .

Заметим, что пространство  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D})$  формально не является линейным подпространством пространства  $\mathcal{U}(\mathcal{D})$ . Также, по построению множество  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D})$  снабжено индуцированной метрикой, порожденной нормой  $\|\cdot\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})}$ .

Вопрос о сходимости решения задачи (2.17) к решению задачи (2.16) сводится к выяснению свойств аппроксимации и устойчивости разностной задачи (2.17) в метриче-

ском пространстве  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D})$ . Сложный вид такого пространства обусловлен необходимостью получения неотрицательного решения для исходной задачи Коши (2.1).

Здесь мы формулируем необходимые определения аппроксимации и устойчивости для случая метрических пространств и известную теорему о сходимости. В подразделе 2.2.3 указывается условие на шаг  $\Delta t$ , гарантирующее существование неотрицательного решения задачи (2.17). Доказательство свойств аппроксимации и устойчивости для этой задачи приводятся в подразделе 2.2.4.

Введем оператор сужения  $\{\cdot\}_{\mathcal{D}}$  вектор-функции  $\mathbf{n}^{(N)}$  на сетку, соответствующую множеству  $\mathcal{D} \equiv \mathcal{D}[N, A]$ . Таким образом имеем  $\{\mathbf{n}^{(N)}\}_{\mathcal{D}} \equiv [n_k^{(N, \alpha)}] \in \mathbb{R}^{N \times (A+1)}$  в обозначениях  $n_k^{(N, \alpha)} := n_k^{(N)}(\alpha \cdot \Delta t)$ .

**Определение 9.** *Разностная задача (2.17) аппроксимирует дифференциальную задачу (2.16), если при стремлении  $\Delta t \rightarrow 0$  выполняется следующее условие сходимости  $\left\| \mathcal{L}[\{\mathbf{n}^{(N)}\}_{\mathcal{D}}] - \mathbf{U}_{\mathcal{D}}^{(0)} \right\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})} \rightarrow 0$ .*

**Определение 10.** *Разностная задача (2.17) называется устойчивой на заданном подмножестве  $\mathcal{V} \subseteq \mathcal{U}(\mathcal{D})$ , если: (1) для некоторого  $\varepsilon > 0$  при всех  $0 < \Delta t < \varepsilon$  и  $\mathbf{U}_{\mathcal{D}}^{(0)} \in \mathcal{V}$  существует единственное решение задачи (2.17) и (2) для решений  $\mathbf{F}_{\mathcal{D}}$  и  $\mathbf{G}_{\mathcal{D}}$  задачи (2.17) при соответствующих начальных данных  $\mathbf{V}_{\mathcal{D}}^{(0)}, \mathbf{W}_{\mathcal{D}}^{(0)} \in \mathcal{V}$  из замкнутой окрестности нуля некоторого радиуса  $r > 0$  найдется константа  $c = c(\Delta t, r)$ , при которой справедливо соотношение*

$$\|\mathbf{F}_{\mathcal{D}} - \mathbf{G}_{\mathcal{D}}\|_{\mathcal{M}(\mathcal{D})} \leq c \cdot \left\| \mathbf{V}_{\mathcal{D}}^{(0)} - \mathbf{W}_{\mathcal{D}}^{(0)} \right\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})}. \quad (2.18)$$

**Определение 11.** *Решение разностной задачи (2.17) сходится к решению дифференциальной задачи (2.16), если выполняется условие  $\left\| \{\mathbf{n}^{(N)}\}_{\mathcal{D}} - \mathbf{M}_{\mathcal{D}} \right\|_{\mathcal{M}(\mathcal{D})} \rightarrow 0$  при стремлении  $\Delta t \rightarrow 0$ .*

**Теорема 2.** *Из аппроксимации и устойчивости на множестве  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D}) \subset \mathcal{U}(\mathcal{D})$  разностной задачи (2.17) следует сходимость решения (2.17) к решению дифференциальной задачи (2.16).*

### 2.2.3 Оценка на шаг по времени для разностной схемы

Здесь мы приведем следующее утверждение, обосновывающее необходимость выбора малого шага в разностной схеме из соображений получения неотрицательного решения.

**Лемма 7.** *Предположим, что выполняются условия леммы 6, и имеет место оценка на шаг по времени*

$$\Delta t \leq 2 \cdot (1 - 2^{-1/D}) / \zeta, \quad \zeta := \sum_{d=2}^D \frac{1}{(d-1)!} \cdot \left\| \mathbf{e}_N^{(d)} \right\|_{\mathcal{D}^{(d)}} \cdot \left\| \mathbf{n}_N^{(0)} \right\|_{0,0}^{d-1}. \quad (2.19)$$

Тогда решение  $\mathbf{M}_\mathcal{D}$  разностной задачи (2.17) покомпонентно ограничено и неотрицательно, причем справедливы оценки

$$\left\| \mathbf{m}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \leq \left\| \mathbf{n}_N^{(0)} \right\|_{0,0}, \quad 0 \leq \alpha \leq A, \quad 2\alpha \in \mathbb{Z}.$$

*Доказательство.* Для доказательства леммы применим метод математической индукции по  $\alpha$ . База индукции выполнена, поскольку ограниченность и неотрицательность функции  $\mathbf{m}_N^{(0)} \equiv \mathbf{n}_N^{(0)}$  следует из условия леммы.

Проведем шаг индукции. Предположим, что утверждение леммы уже проверено для значений  $\mathbf{m}_N^{(\alpha)}$  при  $0 \leq \alpha \leq \xi$  и  $\xi \in \mathbb{Z}$ . Из соотношений (2.15) и неотрицательности величин  $\mathbf{m}_N^{(\alpha)}$  по предположению индукции получаем

$$\begin{aligned} m_k^{(\xi+1/2)} &= m_k^{(\xi)} + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}_k^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\xi)} \right] \geq \\ &\geq m_k^{(\xi)} - \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \frac{m_k^{(\xi)}}{(d-1)!} \sum_{\mathbf{i}_{d-1} > 0} C_{\mathbf{i}_{d-1}, k}^{(d)} \cdot m_{i_1}^{(\xi)} \cdot m_{i_2}^{(\xi)} \cdot \dots \cdot m_{i_{d-1}}^{(\xi)}. \end{aligned}$$

Поскольку имеют место ограничения

$$C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \leq \max_{\mathbf{i}_d \in \mathcal{I}_N^{(d)}} C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \equiv \left\| \mathbf{e}_N^{(d)} \right\|_{\mathcal{D}^{(d)}}, \quad \sum_{k=1}^N m_k^{(\xi)} \equiv \left\| \mathbf{m}_N^{(\xi)} \right\|_{0,0} \leq \left\| \mathbf{n}_N^{(0)} \right\|_{0,0},$$

то справедливо неравенство

$$m_k^{(\xi+1/2)} \geq m_k^{(\xi)} \cdot \left( 1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \zeta \right).$$

Таким образом при условии (2.19) из неотрицательности компоненты  $m_k^{(\xi)}$  по предположению индукции следует неотрицательность величины  $m_k^{(\xi+1/2)}$ . Из полученного ограничения на компоненты и соотношений (2.15) аналогичным образом выводится следующая цепочка неравенств

$$\begin{aligned} m_k^{(\xi+1)} &= m_k^{(\xi)} + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{S}_k^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\xi+1/2)} \right] \geq \\ &\geq m_k^{(\xi)} + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{P}_k^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\xi+1/2)} \right] - m_k^{(\xi+1/2)} \cdot \Delta t \cdot \zeta \geq \\ &\geq m_k^{(\xi)} \cdot (1 - \Delta t \cdot \zeta) + \Delta t \cdot \sum_{d=2}^D \mathcal{P}_k^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\xi)} \right] \cdot \left[ \left( 1 - \frac{\Delta t}{2} \cdot \zeta \right)^D - \frac{\Delta t}{2} \cdot \zeta \right]. \end{aligned}$$

Снова пользуясь условием (2.19) и неотрицательностью всех компонент вектора  $\mathbf{m}_N^{(\xi)}$ , получаем неотрицательность величины  $m_k^{(\xi+1)}$ .

Докажем ограниченность нормы вектора  $\mathbf{m}_N^{(\xi+1)}$ . Заметим, что для усеченных операторов  $\mathcal{S}^{(d)}$  при любом векторе  $\mathbf{f} \in \mathcal{F}_+(0, 0)$  выполняется соотношение

$$\sum_{k=1}^N \mathcal{S}_k^{(d)} [\mathbf{c}_N^{(d)}; \mathbf{f}_N] \leq 0.$$

Указанная оценка доказывается по аналогии с неравенством (2.4) для исходных операторов  $\mathcal{S}^{(d)}$ . Из последнего неравенства для любого  $\alpha \in \mathbb{Z}$  при  $0 \leq \alpha \leq \xi$  получаем

$$\left\| \mathbf{m}_N^{(\alpha+1)} \right\|_{0,0} = \left\| \mathbf{m}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} + \Delta t \cdot \sum_{k=1}^N \mathcal{S}_k^{(d)} [\mathbf{c}_N^{(d)}; \mathbf{m}_N^{(\alpha+1/2)}] \leq \left\| \mathbf{m}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0}.$$

Следовательно, имеет место цепочка ограничений

$$\left\| \mathbf{m}_N^{(\xi+1)} \right\|_{0,0} \leq \left\| \mathbf{m}_N^{(\xi)} \right\|_{0,0} \leq \dots \leq \left\| \mathbf{m}_N^{(0)} \right\|_{0,0} = \left\| \mathbf{n}_N^{(0)} \right\|_{0,0}.$$

Аналогичным образом доказывается ограниченность нормы вектора  $\mathbf{m}_N^{(\xi+1/2)}$ . Лемма доказана.  $\square$

Заметим, что для неограниченных ядер  $\mathbf{c}^{(d)}$  на практике требуется выбирать очень маленький шаг  $\Delta t$ . Это, вкупе с ростом числа задействованных уравнений, влечет необходимость проводить огромное количество арифметических операций, либо использовать иные разностные методы, например неявные.

## 2.2.4 Сходимость решения разностной задачи к решению усеченной дифференциальной задачи

**Лемма 8.** *Разностная задача (2.17) является устойчивой на множестве  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D})$ . Более того, найдется константа  $b > 0$  такая, что для решений  $\mathbf{F}_{\mathcal{D}} = [\mathbf{f}_N^{(0)}, \mathbf{f}_N^{(1)}, \dots, \mathbf{f}_N^{(A)}]$  и  $\mathbf{G}_{\mathcal{D}} = [\mathbf{g}_N^{(0)}, \mathbf{g}_N^{(1)}, \dots, \mathbf{g}_N^{(A)}]$  задачи (2.17) с соответствующими начальными данными  $\mathbf{V}_{\mathcal{D}}^{(0)} = [\mathbf{f}_N^{(0)}, \mathbf{O}]$  и  $\mathbf{W}_{\mathcal{D}}^{(0)} = [\mathbf{g}_N^{(0)}, \mathbf{O}]$  из множества  $\mathcal{U}_+(\mathcal{D})$  справедлива оценка*

$$\max_{0 \leq \alpha \leq A} \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \leq b \cdot \left\| \mathbf{f}_N^{(0)} - \mathbf{g}_N^{(0)} \right\|_{0,0}. \quad (2.20)$$

*Доказательство.* Существование решения  $\mathbf{M}_{\mathcal{D}} \equiv [\mathbf{m}_N^{(0)}, \mathbf{m}_N^{(1)}, \dots, \mathbf{m}_N^{(A)}]$  разностной задачи (2.17) очевидно. По лемме 7 имеет место ограниченность указанного решения  $\mathbf{m}_N^{(\alpha)}$  на каждой итерации  $\alpha$ , а значит и его единственность. Таким образом для обоснования устойчивости задачи (2.17) достаточно проверить выполнение неравенства (2.18).

Сначала покажем справедливость оценки (2.20). Положим

$$\beta := \max_{2 \leq d \leq D} \left\| \mathbf{e}_N^{(d)} \right\|_{\mathcal{B}^{(d)}}, \quad \phi := \left\| \mathbf{f}_N^{(0)} \right\|_{0,0}, \quad \psi := \left\| \mathbf{g}_N^{(0)} \right\|_{0,0}.$$

В силу симметрии усеченных ядер  $\mathbf{e}_N^{(d)}$  имеет место следующее тождество

$$\mathcal{S}^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{f}_N^{(\alpha)} \right] - \mathcal{S}^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right] \equiv \sum_{\lambda=1}^d \mathcal{S}^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)}, (\lambda-1) \times \mathbf{f}_N^{(\alpha)}, (d-\lambda) \times \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right].$$

Пусть  $0 \leq \alpha \leq A$ . Далее мы используем указанное выше тождество, оценки  $\left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \leq \phi$  и  $\left\| \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \leq \psi$  (верные в силу леммы 7), а также аналог неравенства (2.9) для усеченных полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$ . Таким образом для некоторой константы  $\zeta = \zeta(\beta, \phi, \psi)$  справедлива цепочка неравенств

$$\begin{aligned} & \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha+1/2)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha+1/2)} \right\|_{0,0} \leq \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} + \\ & + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \sum_{\lambda=1}^d \left\| \mathcal{S}^{(d)} \left[ \mathbf{e}_N^{(d)}; \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)}, (\lambda-1) \times \mathbf{f}_N^{(\alpha)}, (d-\lambda) \times \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right] \right\|_{0,0} \leq \\ & \leq \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \cdot \left[ 1 + \frac{\Delta t}{2} \cdot \sum_{d=2}^D \left\| \mathbf{e}_N^{(d)} \right\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \cdot \sum_{\lambda=1}^d \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0}^{\lambda-1} \left\| \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0}^{d-\lambda} \right] \leq \\ & \leq \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \cdot \left( 1 + \frac{\Delta t}{2} \cdot \zeta \right). \end{aligned}$$

Аналогично для некоторой константы  $\chi = \chi(\beta, \phi, \psi) \geq \zeta$  выводятся соотношения

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha+1)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha+1)} \right\|_{0,0} & \leq \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} + \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha+1/2)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha+1/2)} \right\|_{0,0} \cdot \Delta t \cdot \zeta \leq \\ & \leq \left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \cdot (1 + \Delta t \cdot \chi) \end{aligned}$$

Следовательно, по индукции для  $0 \leq \alpha \leq A$  имеем

$$\left\| \mathbf{f}_N^{(\alpha)} - \mathbf{g}_N^{(\alpha)} \right\|_{0,0} \leq \left\| \mathbf{f}_N^{(0)} - \mathbf{g}_N^{(0)} \right\|_{0,0} \cdot (1 + \Delta t \cdot \chi)^{\lfloor t/\Delta t \rfloor}.$$

Ясно, что при малом шаге  $\Delta t$  выполняется оценка  $(1 + \Delta t \cdot \chi)^{\lfloor t/\Delta t \rfloor} \leq e^{T \cdot \chi} =: b$  всюду на отрезке  $0 \leq t \leq T$ , что обосновывает справедливость ограничения (2.20).

Аналогичным образом при использовании оценки (2.7) для случая усеченных полилинейных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  можно указать такую константу  $c = c(T, \beta, \phi, \psi) > 0$ , что на каждой итерации  $0 \leq \alpha \leq A$  выполнены неравенства

$$\max_{1 \leq k \leq N} \left| f_k^{(\alpha)} - g_k^{(\alpha)} \right| \leq c \cdot \max_{1 \leq k \leq N} \left| f_k^{(0)} - g_k^{(0)} \right|.$$

Последнее гарантирует устойчивость разностной задачи (2.17), поскольку

$$\|\mathbf{F}_{\mathcal{D}} - \mathbf{G}_{\mathcal{D}}\|_{\mathcal{M}(\mathcal{D})} \equiv \max_{\substack{1 \leq \alpha \leq A, \\ 1 \leq k \leq N}} |f_k^{(\alpha)} - g_k^{(\alpha)}| \leq c \cdot \max_{1 \leq k \leq N} |f_k^{(0)} - g_k^{(0)}| \equiv c \cdot \|\mathbf{V}_{\mathcal{D}}^{(0)} - \mathbf{W}_{\mathcal{D}}^{(0)}\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})}.$$

Лемма доказана.  $\square$

**Лемма 9.** *Разностная задача (2.17) аппроксимирует дифференциальную задачу (2.16).*

*Доказательство.* Пусть  $1 \leq \alpha \leq A$ . Индукцией по порядку дифференцирования устанавливается, что решение  $\mathbf{n}^{(N)}(t)$  усеченной задачи (2.16) является покомпонентно трижды непрерывно-дифференцируемой функцией для любого  $0 \leq t \leq T$ . Следовательно, имеют место разложения величин  $n_k^{(N, \alpha)} \equiv n_k^{(N)}(\alpha \cdot \Delta t)$  и  $n_k^{(N, \alpha-1)} \equiv n_k^{(N)}((\alpha-1) \cdot \Delta t)$  в ряд Тейлора до членов второго порядка в точке  $n_k^{(N, \alpha-1/2)} \equiv n_k^{(N)}((\alpha-1/2) \cdot \Delta t)$ :

$$\begin{aligned} n_k^{(N)}(\alpha \cdot \Delta t) &= \left\{ n_k^{(N)} + \frac{dn_k^{(N)}}{dt} \cdot \frac{\Delta t}{2} + \frac{d^2 n_k^{(N)}}{dt^2} \cdot \frac{(\Delta t)^2}{8} \right\} ((\alpha-1/2) \cdot \Delta t) + O((\Delta t)^3), \\ n_k^{(N)}((\alpha-1) \cdot \Delta t) &= \left\{ n_k^{(N)} - \frac{dn_k^{(N)}}{dt} \cdot \frac{\Delta t}{2} + \frac{d^2 n_k^{(N)}}{dt^2} \cdot \frac{(\Delta t)^2}{8} \right\} ((\alpha-1/2) \cdot \Delta t) + O((\Delta t)^3). \end{aligned}$$

С учетом данного факта и вида ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$  получаем следующую цепочку соотношений

$$\begin{aligned} \left\| \mathcal{L}[\{\mathbf{n}^{(N)}\}_{\mathcal{D}}] - \mathbf{U}_{\mathcal{D}}^{(0)} \right\|_{\mathcal{U}(\mathcal{D})} &\equiv \max_{\substack{1 \leq \alpha \leq A, \\ 1 \leq k \leq N}} \left| \frac{1}{\Delta t} \cdot [n_k^{(N, \alpha)} - n_k^{(N, \alpha-1)}] - \sum_{d=2}^D \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{n}_N^{(N, \alpha-1/2)}] \right| = \\ &= \max_{\substack{1 \leq \alpha \leq A, \\ 1 \leq k \leq N}} \left| \left\{ \frac{dn_k^{(N)}}{dt} - \sum_{d=2}^D \mathcal{S}_k^{(d)}[\mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{n}^{(N)}] \right\} ((\alpha-1/2) \cdot \Delta t) + O((\Delta t)^2) \right| = O((\Delta t)^2). \end{aligned}$$

Здесь последнее равенство выполнено, поскольку функция  $\mathbf{n}^{(N)}$  является точным решением усеченной задачи Коши (2.14). Лемма доказана.  $\square$

## 2.2.5 Компактность последовательности решений усеченных задач. Сходимость к решению исходной задачи

**Лемма 10.** *Последовательность решений  $\{\mathbf{n}^{(N)}\}$  для усеченных задач Коши (2.14) при  $N \in \mathbb{N}$  является компактной в пространстве  $C(\mathcal{X}_{\xi}(T))$  всех непрерывных вектор-функций для каждого множества*

$$\mathcal{X}_{\xi}(T) := \{(k, t) \in \mathbb{N} \times \mathbb{R} : 1 \leq k \leq \xi, 0 \leq t \leq T\}, \quad \xi \in \mathbb{N}.$$

*Доказательство.* Зафиксируем  $\xi \in \mathbb{N}$ . Для доказательства компактности последовательности  $\{\mathbf{n}^{(N)}\}$  на множестве  $\mathcal{X}_{\xi}(T)$  достаточно  $\xi$  раз использовать теорему Арцелла [49] для каждой из последовательностей компонент с номерами  $1 \leq k \leq \xi$ . При этом



равномерная ограниченность последовательности  $\{\mathbf{n}^{(N)}\}$  на рассматриваемом множестве следует из оценки леммы 6. Отсюда же и из аналога оценки (2.9) для усеченных форм  $\mathcal{S}^{(d)}$  получаем справедливость следующей цепочки неравенств

$$\begin{aligned} & \max_{1 \leq k \leq \xi} \left| n_k^{(N)}(t_1) - n_k^{(N)}(t_2) \right| \leq \sum_{d=2}^D \sum_{\lambda=1}^d \max_{1 \leq k \leq \xi} \left| \int_{t_1}^{t_2} \mathcal{S}_k^{(d)} \left[ \mathfrak{C}_N^{(d)}; \mathbf{n}^{(N)} \right] (\tau) d\tau \right| \leq \\ & \leq \left[ \sum_{d=2}^D \frac{1}{d!} \left\| \mathfrak{C}_N^{(d)} \right\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \sum_{\lambda=1}^d \left\| \mathbf{n}^{(N)} \right\|_{T,0}^\lambda \right] \cdot |t_1 - t_2| \leq \left[ \sum_{d=2}^D \frac{1}{d!} \left\| \mathfrak{C}^{(d)} \right\|_{\mathcal{B}^{(d)}} \sum_{\lambda=1}^d \left\| \mathbf{n}^{(0)} \right\|_{0,0}^\lambda \right] \cdot |t_1 - t_2|. \end{aligned}$$

Поскольку константа перед  $|t_1 - t_2|$  конечна и не зависит от выбора номера  $N$ , то имеет место равномерная непрерывность функций  $n_k^{(N)}(t)$ . Лемма доказана.  $\square$

**Теорема 3.** *Решение разностной задачи (2.17) при  $N \rightarrow +\infty$  и  $\Delta t \rightarrow 0$  сходится к решению исходной задачи Коши (2.1) в условиях теоремы 1.*

*Доказательство.* Утверждение теоремы непосредственно следует из указанных ниже двух фактов. Во первых, в силу лемм 8 и 9 имеет место сходимость решения разностной задачи (2.17) при фиксированном  $N$  к решению  $\mathbf{n}^{(N)}$  дифференциальной задачи (2.16). Во вторых, утверждение леммы 10 и единственность решения задачи 2.1 означают равномерную по  $t$  сходимость функций  $\mathbf{n}^{(N)}(t)$  к решению  $\mathbf{n}(t)$  на каждом из множеств  $\mathcal{X}_\xi(T)$  для  $\xi \in \mathbb{N}$ . Теорема доказана.  $\square$

Отметим, что обоснование сходимости решения разностного метода (2.15) к решению исходной задачи Коши (2.1) возможно и при принадлежности ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$  классам  $\mathcal{L}^{(d)}$  при более жестких условиях на начальную функцию  $\mathbf{n}^{(0)}$ .

## Глава 3

# Применение тензорных разложений для решения систем многочастичных уравнений типа уравнений Смолуховского

В настоящей главе приводятся необходимые сведения из теории малоранговых тензорных аппроксимаций. Приводятся описания и перечисляются свойства известных широко используемых разложений с разделенными переменными.

В главе излагаются основные идеи и результаты работ [21, 22], в написании которых автор принимал непосредственное участие. Указанные идеи являются обобщением и продолжением исследований [20, 38, 51] для дискретных и непрерывных двухчастичных кинетических уравнений типа Смолуховского. Предлагаются эффективные алгоритмы приближенного численного решения систем уравнений более общего вида, допускающих множественные столкновения агрегатов. Данные алгоритмы организации вычислений в разностной схеме предиктор-корректор основываются на применении малоранговых тензорных аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов и быстрых алгоритмов линейной алгебры. При этом по сравнению с наивной организацией вычислений значительно снижены асимптотика алгоритмической сложности шага разностной схемы Рунге-Кутты второго порядка и количество используемых ячеек оперативной памяти за счет эффективных алгоритмов вычисления операторов «сдвинутой итерированной свертки»  $\mathcal{P}^{(D)}$  и «итерированного умножения на вектор»  $\mathcal{Q}^{(D)}$  с использованием тензорных разложений.

Наконец, настоящая глава содержит необходимые теоретические оценки рангов канонических разложений и разложений в формате тензорного поезда для некоторых модельных массивов кинетических коэффициентов. Полученные теоретические оценки подтверждают эффективность разработанных алгоритмов организации вычислений

и возможность их применения для решений систем многочастичных кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского, определяющих широкий класс математических моделей.

## 3.1 Тензорные разложения

В данном разделе сравниваются основные известные тензорные разложения с целью выявления наиболее подходящего из них для эффективного представления массивов кинетических коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(D)}$  в памяти и быстрого вычисления операторов  $\mathcal{P}^{(D)}$  и  $\mathcal{Q}^{(D)}$ , определенных в главе 1. Такие представления многомерных массивов (или многомерных матриц, называемых также тензорами) являются обобщениями скелетного разложения обычных (двумерных) матриц и основаны на идее разделения переменных. В разделе также вводятся связанные обозначения, необходимые для описания алгоритмов эффективной реализации вычислений в разностной схеме (1.5). За более подробным описанием тензорных представлений и их свойств мы отсылаем читателя к обзорам [52, 53].

### 3.1.1 Тензорные аппроксимации

Предположим, что задан тензор

$$\mathfrak{C} = [C_{\mathbf{i}_D}] \in \mathbb{R}^{N \times N \times \dots \times N},$$

$$\mathbf{i}_D \in \mathcal{I}_N^{(D)} := \{(i_1, i_2, \dots, i_D) \in \mathbb{N}^D : 1 \leq i_\lambda \leq N, 1 \leq \lambda \leq D\}.$$

Говорят, что тензор  $\mathfrak{A} \in \mathbb{R}^{N \times N \times \dots \times N}$  (одинаковых с  $\mathfrak{C}$  размеров) аппроксимирует  $\mathfrak{C}$ , если  $\|\mathfrak{A} - \mathfrak{C}\|_F < \varepsilon$  для некоторой фиксированной допустимой погрешности  $\varepsilon > 0$ . Здесь и далее фробениусова норма  $\|\cdot\|_F$  для заданного тензора  $\mathfrak{C}$  определяется выражением

$$\|\mathfrak{C}\|_F^2 := \sum_{\mathbf{i}_D \in \mathcal{I}_N^{(D)}} |C_{\mathbf{i}_D}|^2.$$

Под аппроксимацией данного тензора  $\mathfrak{C}$  понимается построение какого-либо тензора  $\mathfrak{A}$  определенного вида (иначе, формата), который аппроксимирует тензор  $\mathfrak{C}$  с фиксированной погрешностью  $\varepsilon$ .

В настоящей главе в том числе обсуждается наличие известных алгоритмов малоранговых аппроксимаций, то есть аппроксимаций массива  $\mathfrak{C}$  при помощи некоторого тензора  $\mathfrak{A}$ , который определяется малым числом параметров.

### 3.1.2 Каноническое разложение

Самым простым с теоретической точки зрения способом обобщить скелетное разложение матриц, но не слишком удобным с практической, является каноническое (полилинейное, CP) разложение. В таком разложении элементы тензора  $\mathfrak{C}$  представляются в следующем виде

$$C_{i_D} = \sum_r u_{i_1,r}^{(1)} \cdot u_{i_2,r}^{(2)} \cdot \dots \cdot u_{i_D,r}^{(D)} \quad (3.1)$$

Число слагаемых  $R$  в сумме из правой части называется рангом разложения (3.1). Минимальное возможное значение  $R$  среди всех разложений указанного вида называется каноническим тензорным рангом (или просто рангом) тензора  $\mathfrak{C}$ . Матрицы

$$\mathbf{U}^{(\lambda)} := \left[ u_{i_\lambda,r}^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{N \times R}, \quad 1 \leq \lambda \leq D$$

называются факторами канонического разложения (3.1). Указанное представление тензоров изначально было предложено в работе [54]. Основным преимуществом такого представления при малом  $R$  является малое число  $O(DRN)$  определяющих его параметров, а следовательно и малое число ячеек памяти, необходимых для хранения тензора.

Однако, поиск приближенных разложений малого ранга указанного вида при  $D > 2$  представляет весьма трудную задачу, так как неизвестны надежные алгоритмы их вычисления. Приближенное каноническое разложение можно пытаться вычислить с помощью известных итерационных алгоритмов, например методом переменных направлений (ALS) [55]. Сложность итерации такого алгоритма составляет  $O(R^3 + R^2N)$ , если известен ранг  $R$  текущей аппроксимации рассматриваемого тензора [56]. Важно отметить, что алгоритмы указанного вида могут работать медленно и не гарантируют сходимости к оптимальному разложению. Более того, априорное знание канонического ранга  $R$  фактически невозможно в общем случае.

В следующем подразделе 3.1.3 приводятся утверждения, из которых следует, что почти любой  $D$ -мерный тензор  $\mathfrak{C} \in \mathbb{R}^{N \times N \times \dots \times N}$  имеет ранг не ниже  $O(N^{D-1}/D)$ . Последнее в общем случае означает, что если канонический ранг все же удалось отыскать, то он почти наверняка окажется очень большим.

### 3.1.3 Глобальные свойства тензорного ранга

Как уже было отмечено в подразделе 3.1.2, естественным многомерными обобщениями понятий скелетного разложения матриц и матричного ранга представляются каноническое разложение и ранг тензора, соответственно. Такое разложение является оптимальным малопараметрическим тензорным представлением, однако его использование

в приложениях затруднено рядом проблем. Например, вычисление канонического тензорного ранга заданного (вещественного или комплексного) тензора размерности  $D > 2$  в общем случае требует астрономических затрат по времени [57]. Последний факт заключается в следующем. Если свойства двумерных матриц в целом и понятие ранга в частности хорошо изучены и сводятся к изучению свойств линейных систем, то исследование свойств канонического разложения сопряжено с большими трудностями. В таком исследовании неизбежно возникают полиномиальные уравнения многих переменных, а следовательно задействован аппарат алгебраической геометрии. Не является исключением из этого правила и понятие главного тензорного ранга.

**Определение 12.** *Главным называется минимальный канонический ранг, принимаемый всеми тензорами из некоторого множества ненулевой меры в пространстве тензоров фиксированных размеров с элементами из заданного поля.*

Необходимо отметить, что определение очевидно для вещественных и комплексных двумерных тензоров, так как при  $D = 2$  почти любая матрица размеров  $N \times N$  имеет полный ранг  $N$ . При  $D \geq 3$  ситуация обстоит значительно сложнее. Во первых, само доказательство факта существования главного ранга над произвольным полем не является тривиальным. Для трехмерных комплексных тензоров его можно найти, например, в работах [57–59]. Во вторых, почти все тензоры фиксированных размеров с комплексными элементами принимают один и тот же ранг, что вообще говоря не верно для вещественных тензоров [58]. Можно лишь утверждать, что комплексный главный ранг совпадает с вещественным при совпадающих размерах тензоров из комплексного и вещественного пространств [60]. В третьих, главный ранг изучается уже не одно десятилетие, но до сих пор не известна теорема, устанавливающая значение главного ранга в произвольном случае. В работе [58] на основании известных частных случаев предлагается гипотеза о значении главного ранга трехмерных комплексных тензоров.

Величину главного тензорного ранга можно пытаться вычислить, опираясь на аппарат алгебраической геометрии, что предполагает подсчет размерностей специальных многообразий. Такой способ был применен, например, в работах [61,62] для вычисления главного ранга тензоров некоторых тензорных пространств старших размерностей. Еще один потенциальный способ вычисления главного ранга основан на его эквивалентном определении через главный ранг полиномиальных матричнозначных отображений.

**Определение 13.** *Матричнозначными называются отображения, значениями которых являются комплексные матрицы фиксированных размеров.*

**Определение 14.** *Главным рангом матричнозначного отображения называется число, являющееся рангом значения отображения (то есть матрицы комплексных чисел) почти для всех значений аргумента.*

В качестве примера далее рассматривается случай трехмерных комплексных тензоров из пространства  $\mathbb{C}^{N_1 \times N_2 \times N_3}$  для заданных натуральных чисел  $N_1$ ,  $N_2$  и  $N_3$ . Пусть набор координат арифметического вектора  $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^{N_1+N_2+N_3}$  разбит на три группы по  $N_1$ ,  $N_2$  и  $N_3$  координат, из которых в порядке следования составлены вектор-столбцы  $\mathbf{z}^{(1)}$ ,  $\mathbf{z}^{(2)}$  и  $\mathbf{z}^{(3)}$ . При использовании указанных обозначений введем следующие матричнозначные отображения

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_k &: \mathbb{C}^{N_1+N_2+N_3} \rightarrow \mathbb{C}^{N_1 N_2 N_3 \times N_k}, \quad k = 1, 2, 3; \\ \mathcal{J} &: \mathbb{C}^{N_1+N_2+N_3} \rightarrow \mathbb{C}^{N_1 N_2 N_3 \times (N_1+N_2+N_3)},\end{aligned}$$

которые задаются своими образами

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_1(\mathbf{z}) &:= \mathbf{I}_{N_1} \otimes \mathbf{z}^{(2)} \otimes \mathbf{z}^{(3)}, & \mathbf{J}_2(\mathbf{z}) &:= \mathbf{z}^{(1)} \otimes \mathbf{I}_{N_2} \otimes \mathbf{z}^{(3)}, & \mathbf{J}_3(\mathbf{z}) &:= \mathbf{z}^{(1)} \otimes \mathbf{z}^{(2)} \otimes \mathbf{I}_{N_3}, \\ \mathbf{J}(\mathbf{z}) &:= [\mathbf{J}_1(\mathbf{z}), \mathbf{J}_2(\mathbf{z}), \mathbf{J}_3(\mathbf{z})].\end{aligned}$$

Здесь  $\mathbf{I}_N$  есть единичная матрица порядка  $N$ , а операция « $\otimes$ » представляет собой кронекерово произведение матриц. При использовании только что введенных отображений сформулируем теорему о главных рангах. Ее доказательство можно найти, например, в работе [58].

**Теорема 4.** *Главный ранг для пространства тензоров  $\mathbb{C}^{N_1 \times N_2 \times N_3}$  равен минимальному числу  $R$  блоков  $\mathcal{J}(\mathbf{z}_r)$  для  $1 \leq r \leq R$ , которое необходимо взять, чтобы главный ранг матричнозначного отображения*

$$[\mathcal{J}(\mathbf{z}_1), \mathcal{J}(\mathbf{z}_2), \dots, \mathcal{J}(\mathbf{z}_R)] \tag{3.2}$$

*был равен величине  $N_1 N_2 N_3$ , при условии независимости в совокупности всех координат векторных аргументов  $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \dots, \mathbf{z}_R \in \mathbb{C}^{N_1+N_2+N_3}$ .*

Как видно из его вида, отображение (3.2) является матричнозначным и полиномиальным образом зависит от своих скалярных аргументов (то есть координат векторов  $\mathbf{z}_r$ ), что следует из вида элементов блоков  $\mathbf{J}_k$ . Полиномиальная зависимость, как нетрудно убедиться, гарантирует существование главного ранга для указанного отображения.

Нетрудно показать, что для любого вектора  $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^{N_1+N_2+N_3}$  ранг матрицы  $\mathbf{J}(\mathbf{z})$  не превосходит величины  $N_1 + N_2 + N_3 - 2$ . Из данного факта и теоремы 4 немедленно следует оценка снизу на главный ранг пространства  $\mathbb{C}^{N_1 \times N_2 \times N_3}$  следующего вида

$$R \geq \left\lceil \frac{N_1 N_2 N_3}{N_1 + N_2 + N_3 - 2} \right\rceil.$$

Теорема может быть обобщена на случай многомерных тензоров. Таким образом яс-

но, что почти любой  $D$ -мерный комплексный (а равно и вещественный) тензор размера  $N \times N \times \dots \times N$  имеет ранг не ниже  $O(N^{D-1}/D)$ .

Значение величины главного ранга  $R$  в частном, но тем не менее важном случае  $N_1 = N_2 = N_3 = N$  известно и совпадает с указанной выше оценкой при  $N \neq 3$  (значение  $R$  на единицу больше оценки, иначе). Доказательство последнего утверждения приведено в работе [63] и использует результаты из [64]. Данные исследования могут считаться первым шагом на пути к вычислению главного ранга произвольных трехмерных комплексных тензоров. В указанных работах была применена идея редукции («splitting technique») задачи вычисления главного ранга матричнозначного отображения вида (3.2) к «меньшим» задачам для аналогичных отображений, определяющих некоторые подматрицы на пересечении фиксированных строк и столбцов в исходном отображении. Однако, найденные подматрицы помимо блоков-триплетов  $\mathcal{J}$  неизбежно содержат свободные блоки  $\mathcal{J}_1$ ,  $\mathcal{J}_2$  или  $\mathcal{J}_3$  (не входящие ни в один триплет). Последнее означает наличие необходимости уметь вычислять главные ранги матричнозначных отображений более общего вида, чем (3.2). Попыткой решить такую задачу является, например, работа [23], где рассматривались матричнозначные отображения, состоящие из блоков  $\mathcal{J}_1$ ,  $\mathcal{J}_2$  и  $\mathcal{J}_3$ , чьи аргументы независимы в совокупности.

### 3.1.4 Разложение Таккера

Другим широко известным применением идеи разделения переменных в случае многомерных тензоров (помимо канонического разложения) является разложение Таккера, впервые рассмотренное в работе [65]. Оно определяется соотношениями

$$C_{\mathbf{i}_D} = \sum_{\mathbf{r}_D} G_{\mathbf{r}_D} \cdot v_{i_1, r_1}^{(1)} \cdot v_{i_2, r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot v_{i_D, r_D}^{(D)}, \quad \mathbf{r}_D \equiv (r_1, r_2, \dots, r_D). \quad (3.3)$$

Если индексы  $r_\lambda$  изменяются в пределах  $1 \leq r_\lambda \leq R_\lambda$  для  $1 \leq \lambda \leq D$ , то числа  $R_\lambda$  называются рангами разложения Таккера (3.3). Минимальные возможные значения  $R_\lambda$  среди всех разложений указанного вида называются рангами Таккера тензора  $\mathfrak{C}$ . Введем обозначения для следующих массивов:

$$\mathfrak{G} := [G_{\mathbf{r}_D}] \in \mathbb{R}^{R_1 \times R_2 \times \dots \times R_D}, \quad \mathbf{V}^{(\lambda)} := [v_{i_\lambda, r_\lambda}^{(\lambda)}] \in \mathbb{R}^{N \times R_\lambda}, \quad 1 \leq \lambda \leq D.$$

Тензор  $\mathfrak{G}$  называется ядром, а матрицы  $\mathbf{V}^{(\lambda)}$  называются факторами разложения Таккера (3.3). Положим  $R := \max\{R_\lambda : 1 \leq \lambda \leq D\}$ . Для указанного представления тензора  $\mathfrak{C}$  существует устойчивый алгоритм аппроксимации сложности  $O(R^D N)$ , основанный на поиске сингулярных разложений некоторых специальных матриц [65, 66]. Однако практическая применимость разложения Таккера существенно зависит от малости величины  $R$ , поскольку необходимо оперировать массивом параметров с экспоненци-

альным по  $D$  количеством элементов  $O(R^D + DRN)$ , определяющих разложение.

### 3.1.5 ТТ-разложение

При большой размерности  $D$  имеет смысл рассматривать ТТ-разложение (тензорный поезд), не имеющее недостатков описанных выше разложений [67, 68]. В таком представлении элементы ядра  $\mathfrak{C}$  можно записать в виде

$$C_{i_D} = \sum_{\mathbf{r}_{D-1}} H_{r_0, i_1, r_1}^{(1)} \cdot H_{r_1, i_2, r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot H_{r_{D-1}, i_D, r_D}^{(D)}, \quad r_0 = r_D = 1; \quad (3.4)$$

$$\mathbf{r}_{D-1} \equiv (r_1, r_2, \dots, r_{D-1}).$$

Предположим, что индексы  $r_\lambda$  для  $0 \leq \lambda \leq D$  изменяются в пределах  $1 \leq r_\lambda \leq R_\lambda$ . Числа  $R_\lambda$  называются рангами ТТ-разложения (3.4). Минимальные возможные значения  $R_\lambda$  среди всех разложений указанного вида называются ТТ-рангами тензора  $\mathfrak{C}$ . Тензоры

$$\mathfrak{H}^{(\lambda)} := \left[ H_{r_{\lambda-1}, i_\lambda, r_\lambda}^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N \times R_\lambda}, \quad 1 \leq \lambda \leq D,$$

называются факторами (или ядрами) разложения (3.4). Указанное тензорное представление задается  $O(DR^2N)$  параметрами, где  $R := \max\{R_\lambda : 0 \leq \lambda \leq D\}$ . Для рассматриваемого представления существует устойчивый метод аппроксимации тензора  $\mathfrak{C}$  по части его элементов, требующий  $O(D^2R^2N + DR^3N)$  операций [69].

### 3.1.6 Сводная таблица характеристик тензорных разложений

Важно отметить, что если число  $R$  задает значение канонического ранга тензора  $\mathfrak{C}$ , то все ранги Таккера и ТТ-ранги указанного тензора ограничены величиной  $R$  сверху [68]. С учетом данного обстоятельства приводится сводная таблица 1 основных свойств рассмотренных тензорных разложений (3.1), (3.3), (3.4). Ясно, что если удалось найти аппроксимации ядер каноническими разложениями, то их применение для представления массивов кинетических коэффициентов существенно снизит затраты на объемы требуемой памяти по сравнению с наивными вычислениями.



Таблица 1: Сравнение тензорных разложений для  $D$ -мерного массива размера  $N \times N \times \dots \times N$  канонического ранга  $R$ .

Разложение	Число используемых ячеек памяти	Сложность аппроксимации	Наличие устойчивых алгоритмов аппроксимации
Каноническое (CP)	$O(DRN)$	Сложность итерации: $O(R^3 + R^2N)$	Неизвестны
Таккера	$O(R^D + DRN)$	$O(R^D N)$	Известны
Тензорный поезд (TT)	$O(DR^2N)$	$O(DR^3N)$	Известны

## 3.2 Методы ускорения вычислений в разностной схеме предиктор-корректор

В данном разделе на примере ядра  $\mathfrak{C}^{(D)}$  при заданном  $D$  показывается, как с использованием тензорных разложений, описанных в предыдущем разделе 3.1, может быть снижена алгоритмическая сложность вычисления операторов  $\mathcal{P}^{(D)}$  и  $\mathcal{Q}^{(D)}$  в разностной схеме (1.5).

Всюду далее в разделе предполагается, что для ядра  $\mathfrak{C}^{(D)}$  известны следующие аппроксимации с некоторой фиксированной погрешностью  $\varepsilon$  по фробениусовой норме

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \approx \sum_r u_{i_1, r}^{(1)} \cdot u_{i_2, r}^{(2)} \cdot \dots \cdot u_{i_D, r}^{(D)}; \quad (3.5)$$

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \approx \sum_{\mathbf{r}_D} G_{\mathbf{r}_D} \cdot v_{i_1, r_1}^{(1)} \cdot v_{i_2, r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot v_{i_D, r_D}^{(D)}; \quad (3.6)$$

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \approx \sum_{\mathbf{r}_{D-1}} H_{r_0, i_1, r_1}^{(1)} \cdot H_{r_1, i_2, r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot H_{r_{D-1}, i_D, r_D}^{(D)}, \quad r_0 = r_D = 1. \quad (3.7)$$

Ниже будут приведены алгоритмы 1–6 приближенного вычисления операторов  $\mathcal{P}^{(D)}$  и  $\mathcal{Q}^{(D)}$ , основанные на применении тензорных аппроксимаций (3.5)–(3.7). В данных алгоритмах используются следующие операции с векторами: дискретная свертка «\*», поэлементное умножение « $\circ$ », сложение векторов, умножение на скаляр; а также операция умножения матрицы на вектор, в том числе умножение степеней матрицы сдвига  $\mathbf{L} = [L_{i,j}]$  на вектор. Элементы матрицы  $\mathbf{L}$  задаются выражениями  $L_{i,j} = \delta_{i,j+1}$ . Умножение произвольной натуральной степени матрицы сдвига на вектор может быть выполнено за  $O(N)$  арифметических операций. Дискретная свертка векторов из  $N$

элементов эквивалентна умножению матрицы порядка  $2N - 1$  на вектор из  $2N - 1$  компонент (см. [70]) и может быть вычислена с помощью быстрого дискретного преобразования Фурье за  $O(N \log N)$  арифметических операций [48].

### 3.2.1 Операция сдвинутой итерированной свертки

При использовании обозначений  $\mathbf{i}_\lambda = (i_1, i_2, \dots, i_\lambda)$  для  $1 \leq \lambda \leq D - 1$  компоненты оператора  $D! \cdot \mathcal{P}_k^{(D)}$  перепишем в следующем виде

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

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

Необходимо отметить, что равенство  $\mathcal{P}_k^{(D)} = 0$  заведомо выполнено для  $1 \leq k \leq D - 2$ .

Если подставить выражения для приближенного канонического разложения (3.5) и разложения Таккера (3.6) в указанную выше формулу для компонент и изменить порядок суммирования, то в обозначениях  $\hat{u}_{i,r}^{(\lambda)} := u_{i,r}^{(\lambda)} \cdot n_i$  и  $\hat{v}_{i,r}^{(\lambda)} := v_{i,r}^{(\lambda)} \cdot n_i$  можно получить следующие приближенные равенства

$$D! \cdot \mathcal{P}_k^{(D)} \approx \sum_{r=1}^R \left[ \sum_{i_1=1}^{k-D+1} \hat{u}_{i_1,r}^{(1)} \cdot \cdots \cdot \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-|i_{D-3}|} \hat{u}_{i_{D-2},r}^{(D-2)} \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-|i_{D-2}|} \hat{u}_{i_{D-1},r}^{(D-1)} \cdot \hat{u}_{k-|i_{D-1}|,r}^{(D)} \right], \quad (3.8)$$

$$D! \cdot \mathcal{P}_k^{(D)} \approx \sum_{\mathbf{r}_D} G_{\mathbf{r}_D} \cdot \left[ \sum_{i_1=1}^{k-D+1} \hat{v}_{i_1,r_1}^{(1)} \cdot \cdots \cdot \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-|i_{D-3}|} \hat{v}_{i_{D-2},r_{D-2}}^{(D-2)} \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-|i_{D-2}|} \hat{v}_{i_{D-1},r_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \hat{v}_{k-|i_{D-1}|,r_D}^{(D)} \right]. \quad (3.9)$$

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 (3.8) является элементом под номером  $k - D + 2$  итерированной дискретной свертки

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

Аналогичным образом для  $D - 1 \leq k \leq N$  слагаемое в квадратной скобке из правой части соотношения (3.9) при каждом  $1 \leq r \leq R$  является элементом под номером  $k - D + 2$  вектора

$$\hat{\mathbf{v}}_{r_1}^{(1)} * \hat{\mathbf{v}}_{r_2}^{(2)} * \cdots * \hat{\mathbf{v}}_{r_D}^{(D)} \in \mathbb{R}^N, \quad \hat{\mathbf{v}}_{r_\lambda}^{(\lambda)} := \left[ \hat{v}_{1,r_\lambda}^{(\lambda)}, \hat{v}_{2,r_\lambda}^{(\lambda)}, \dots, \hat{v}_{N,r_\lambda}^{(\lambda)} \right]^T.$$

На приведенных наблюдениях основываются алгоритмы 1 и 2 приближенного вычисления сразу всех  $N$  компонент оператора  $\mathcal{P}^{(D)}$ . Сложность данных алгоритмов со-

ставляет  $O(DRN \log N)$  и  $O(DR^D N \log N)$  арифметических операций соответственно, в то время как сложность наивного вычисления компонент есть  $O(N^D)$ .

---

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

---

**Вход:** Факторы  $\mathbf{U}^{(\lambda)} = [\mathbf{u}_r^{(\lambda)}] \in \mathbb{R}^{N \times R}$  приближенного CP-разложения тензора  $\mathcal{C}^{(D)}$ ,

где  $\mathbf{u}_r^{(\lambda)} := [u_{1,r}^{(\lambda)}, u_{2,r}^{(\lambda)}, \dots, u_{N,r}^{(\lambda)}]^T$ ; 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 CP-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.

---



---

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

---

**Вход:** Ядро  $\mathcal{G} = [G_{\mathbf{r}_D}] \in \mathbb{R}^{R_1 \times R_2 \times \dots \times R_D}$  и факторы  $\mathbf{V}^{(\lambda)} = [\mathbf{v}_r^{(\lambda)}] \in \mathbb{R}^{N \times R_\lambda}$  прибли-

женного разложения Таккера тензора  $\mathcal{C}^{(D)}$ , где  $\mathbf{v}_r^{(\lambda)} := [v_{1,r}^{(\lambda)}, v_{2,r}^{(\lambda)}, \dots, v_{N,r}^{(\lambda)}]^T$ ; 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 ФОРМАТЕ ТАККЕРА( $\mathcal{G}, \mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(2)}, \dots, \mathbf{V}^{(D)}, \mathbf{n}_N$ )
2:    $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$  ▷  $O(N)$  операций
3:   Для всех  $\mathbf{r}_D = (r_1, r_2, \dots, r_D) : 1 \leq r_\xi \leq R_\xi, 1 \leq \xi \leq D$  выполнить
4:      $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{v}_{r_D}^{(D)} \circ \mathbf{n}_N$  ▷ Поэлементное умножение,  $O(N)$  операций
5:     Для каждого  $\lambda \leftarrow D - 1, D - 2, \dots, 1$  выполнить
6:        $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{v}_{r_\lambda}^{(\lambda)} \circ \mathbf{n}_N$  ▷ Поэлементное умножение,  $O(N)$  операций
7:        $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{y} * \mathbf{z}$  ▷ Дискретная свертка,  $O(N \log N)$  операций
8:     Конец цикла
9:      $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + G_{\mathbf{r}_D} \cdot \mathbf{y}$  ▷  $O(N)$  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:**  $O(DR^D N \log N)$  арифметических операций.

---

Пусть теперь для ядра  $\mathfrak{C}^{(D)}$  используется приближенное ТТ-разложение (3.7). Действуя по аналогии со случаем аппроксимаций (3.5) и (3.6), 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

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

Таким образом одновременно для всех  $D-1 \leq k \leq N$  значение компоненты  $\mathcal{P}_k^{(D)}$  вычисляется в ходе последовательного по  $\lambda$  применения дискретных сверток по модовому индексу  $i_\lambda$  и суммирования полученных результатов вдоль рангового индекса  $r_\lambda$ . Указанный вычислительный процесс описан в алгоритме 3. Его полная сложность составляет  $O(DR^2N \log N)$  арифметических операций.

---

**Алгоритм 3.** Вычисление оператора  $\mathcal{P}^{(D)}$  в точке  $\mathbf{n}_N$ .

---

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

---

Принимая во внимание наличие необходимости сократить сложность расчетов, име-

ет смысл привести соображения относительно способа вычисления (итерированной) дискретной свертки. Для этого запишем явное выражение операции «\*» через операцию «o» поэлементного умножения [48]. Предположим, что оператор  $\mathcal{F}[\cdot]$  возвращает прямое дискретное преобразование Фурье от дополненного  $N - 1$  нулем с конца своего векторного аргумента из  $N$  компонент. Аналогично введем оператор  $\mathcal{F}^{-1}[\cdot]$ , возвращающий вектор первых  $N$  компонент обратного дискретного преобразования Фурье от своего векторного аргумента из  $2N - 1$  компоненты. Тогда

$$\mathbf{a} * \mathbf{b} \equiv \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[\mathbf{a}] \circ \mathcal{F}[\mathbf{b}]].$$

Заметим, что для алгоритмов 1–3 константный множитель в формуле оценки полной сложности может быть уменьшен, если при вычислении суммы (итерированных) дискретных сверток учитывать справедливость следующего тождества, вытекающего из линейности и ассоциативности дискретного преобразования Фурье:

$$\sum_r \mathbf{a}_r^{(1)} * \mathbf{a}_r^{(2)} * \dots * \mathbf{a}_r^{(A)} \equiv \mathcal{F}^{-1} \left[ \sum_r \mathcal{F}[\mathbf{a}_r^{(1)}] \circ \mathcal{F}[\mathbf{a}_r^{(2)}] \circ \dots \circ \mathcal{F}[\mathbf{a}_r^{(A)}] \right].$$

Например, при вычислении сумм дискретных сверток указанным образом в алгоритме 3, использующем тензорный поезд, количество необходимых вычислений уменьшается на треть. Отметим, что данное обстоятельство использовалось в программной реализации приведенных алгоритмов.

### 3.2.2 Операция итерированного умножения на вектор

По аналогии с рассуждениями предыдущего подраздела в обозначениях  $\widehat{u}_{i,r}^{(\lambda)} \equiv u_{i,r}^{(\lambda)} \cdot n_i$  и  $\widehat{v}_{i,r}^{(\lambda)} \equiv v_{i,r}^{(\lambda)} \cdot n_i$  при использовании аппроксимаций ядра  $\mathfrak{C}^{(D)}$  каноническим разложением (3.5) и разложением Таккера (3.6) получаются приближенные выражения

$$-(D-1)! \cdot \mathcal{Q}_k^{(D)} \approx \sum_{r=1}^R \left[ \sum_{i_1=1}^N \widehat{u}_{i_1,r}^{(1)} \cdot \sum_{i_2=1}^N \widehat{u}_{i_2,r}^{(2)} \cdot \dots \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^N \widehat{u}_{i_{D-1},r}^{(D-1)} \cdot \widehat{u}_{k,r}^{(D)} \right], \quad (3.10)$$

$$-(D-1)! \cdot \mathcal{Q}_k^{(D)} \approx \sum_{\mathbf{r}_D} G_{\mathbf{r}_D} \cdot \left[ \sum_{i_1=1}^N \widehat{v}_{i_1,r_1}^{(1)} \cdot \sum_{i_2=1}^N \widehat{v}_{i_2,r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^N \widehat{v}_{i_{D-1},r_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \widehat{v}_{k,r_D}^{(D)} \right]. \quad (3.11)$$

Ясно, что суммы по модовым индексам  $i_\lambda$  внутри квадратных скобок из правых частей соотношений (3.10) и (3.11) не зависят от индекса  $k$  и могут быть вычислены заранее. После этого находятся суммы по соответствующим ранговым индексам  $r$  либо  $r_\lambda$ , что эквивалентно операциям умножения матрицы на вектор. Эффективная организация указанных вычислений компонент  $\mathcal{Q}_k^{(D)}$  оператора  $\mathcal{Q}^{(D)}$  по формулам (3.10) и (3.11) предлагается в алгоритмах 4 и 5 сложностей  $O(DRN)$  и  $O(DR^{D-1} + R^D + DRN)$  соот-

ответственно. При этом сложность вычисления компонент напрямую составляет  $O(N^D)$  арифметических операций.

---

**Алгоритм 4.** Вычисление оператора  $\mathcal{Q}^{(D)}$  в точке  $\mathbf{n}_N$ .

**Вход:** Факторы  $\mathbf{U}^{(\lambda)} \in \mathbb{R}^{N \times R}$  приближенного СР-разложения тензора  $\mathcal{C}^{(D)}$ ; вектор концентраций  $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$ .

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

- 
- 1: **Функция** УМНОЖЕНИЕ В СР-ФОРМАТЕ ( $\mathbf{U}^{(1)}, \mathbf{U}^{(2)}, \dots, \mathbf{U}^{(D)}, \mathbf{n}_N$ )
  - 2:  $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{1}$  ▷ Вектор из единиц,  $O(R)$  операций
  - 3: **Для каждого**  $\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, D - 1$  **выполнить**
  - 4:      $\mathbf{z} \leftarrow (\mathbf{U}^{(\lambda)})^T \mathbf{n}_N$  ▷ Умножение матрицы на вектор,  $O(RN)$  операций
  - 5:      $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{y} \circ \mathbf{z}$  ▷ Поэлементное умножение,  $O(R)$  операций
  - 6: **Конец цикла**
  - 7:  $\mathbf{x} \leftarrow -\frac{1}{(D-1)!} \mathbf{U}^{(D)} \mathbf{y}$  ▷ Умножение матрицы на вектор,  $O(RN)$  операций
  - 8:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} \circ \mathbf{n}_N$  ▷ Поэлементное умножение,  $O(N)$  операций
  - 9: **Возвратить**  $\mathbf{x}$
  - 10: **Конец функции**

**Полная сложность:**  $O(DRN)$  арифметических операций.

---



---

**Алгоритм 5.** Вычисление оператора  $\mathcal{Q}^{(D)}$  в точке  $\mathbf{n}_N$ .

**Вход:** Ядро  $\mathfrak{G} = [\mathbf{g}_{\mathbf{r}_{D-1}}] \in \mathbb{R}^{R_1 \times R_2 \times \dots \times R_D}$  и факторы  $\mathbf{V}^{(\lambda)} \in \mathbb{R}^{N \times R_\lambda}$  приближенного разложения Таккера для  $\mathcal{C}^{(D)}$ , где  $\mathbf{g}_{\mathbf{r}_{D-1}} := [G_{\mathbf{r}_{D-1},1}, G_{\mathbf{r}_{D-1},2}, \dots, G_{\mathbf{r}_{D-1},R_D}] \in \mathbb{R}^{R_D}$ ; вектор концентраций  $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$ .

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

- 
- 1: **Функция** УМНОЖЕНИЕ В ФОРМАТЕ ТАККЕРА ( $\mathfrak{G}, \mathbf{V}^{(1)}, \mathbf{V}^{(2)}, \dots, \mathbf{V}^{(D)}, \mathbf{n}_N$ )
  - 2: **Для каждого**  $\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, D - 1$  **выполнить**
  - 3:      $[z_1^{(\lambda)}, z_2^{(\lambda)}, \dots, z_{R_\lambda}^{(\lambda)}]^T \leftarrow (\mathbf{V}^{(\lambda)})^T \mathbf{n}_N$  ▷ Умножение матрицы на вектор,  $O(RN)$  операций
  - 4: **Конец цикла**
  - 5:  $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{0}$  ▷  $O(R)$  операций
  - 6: **Для всех**  $\mathbf{r}_{D-1} = (r_1, r_2, \dots, r_{D-1}) : 1 \leq r_\xi \leq R_\xi, 1 \leq \xi \leq D - 1$  **выполнить**
  - 7:      $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{y} + (z_{r_1}^{(1)} \cdot z_{r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot z_{r_{D-1}}^{(D-1)}) \cdot \mathbf{g}_{\mathbf{r}_{D-1}}$  ▷  $O(D + R)$  операций
  - 8: **Конец цикла**
  - 9:  $\mathbf{x} \leftarrow -\frac{1}{(D-1)!} \mathbf{V}^{(D)} \mathbf{y}$  ▷ Умножение матрицы на вектор,  $O(RN)$  операций
  - 10:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} \circ \mathbf{n}_N$  ▷ Поэлементное умножение,  $O(N)$  операций
  - 11: **Возвратить**  $\mathbf{x}$
  - 12: **Конец функции**

**Полная сложность:**  $O(DR^{D-1} + R^D + DRN)$  арифметических операций.

---

В обозначениях  $\widehat{h}_{i,r}^{(\lambda)} \equiv h_{i,r}^{(\lambda)} \cdot n_i$  при использовании аппроксимации ядра  $\mathcal{C}^{(D)}$  тензор-

ным поездом (3.7) имеем соотношения

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

Одновременно для всех  $1 \leq k \leq N$  значения компонент  $\mathcal{Q}_k^{(D)}$  в последней формуле могут быть приближенно найдены как результат последовательного по  $\lambda$  вычисления пар сумм, сначала по модовому индексу  $i_\lambda$ , а затем по ранговому индексу  $r_\lambda$ . Данная схема вычислений лежит в основе алгоритма 6 сложности  $O(DR^2N)$  арифметических операций.

---

**Алгоритм 6.** Вычисление оператора  $\mathcal{Q}^{(D)}$  в точке  $\mathbf{n}_N$ .

---

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

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

---

- 1: **Функция** УМНОЖЕНИЕ В ТТ-ФОРМАТЕ ( $\mathfrak{H}^{(1)}, \mathfrak{H}^{(2)}, \dots, \mathfrak{H}^{(D)}, \mathbf{n}_N$ )
- 2:  $\mathbf{u}_D \leftarrow 1$
- 3: **Для каждого**  $\lambda \leftarrow D, D-1, \dots, 2$  **выполнить**
- 4:     **Для каждого**  $r_\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, R_\lambda$  **выполнить**
- 5:          $\mathbf{z}_{r_\lambda}^{(\lambda)} \leftarrow \mathbf{H}_{r_\lambda}^{(\lambda)} \mathbf{n}_N$       $\triangleright$  Умножение матрицы на вектор,  $O(RN)$  операций
- 6:     **Конец цикла**
- 7:      $\mathbf{u}_{\lambda-1} \leftarrow \left[ \mathbf{z}_1^{(\lambda)}, \mathbf{z}_2^{(\lambda)}, \dots, \mathbf{z}_{R_\lambda}^{(\lambda)} \right] \mathbf{u}_\lambda$       $\triangleright$  Умножение матрицы на вектор,  $\triangleright O(R^2)$  операций
- 8: **Конец цикла**
- 9:  $\mathbf{x} \leftarrow -\frac{1}{(D-1)!} \mathfrak{H}^{(1)} \mathbf{u}_1$       $\triangleright$  Умножение матрицы на вектор,  $O(RN)$  операций
- 10:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} \circ \mathbf{n}_N$       $\triangleright$  Поэлементное умножение,  $O(N)$  операций
- 11: **Возвратить**  $\mathbf{x}$
- 12: **Конец функции**

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

---

### 3.2.3 Сводная таблица сложности операций с использованием тензорных разложений

Ниже в сводной таблице 2 указаны оценки алгоритмической сложности основных операций при работе с тензорными разложениями: получения приближенных тензорных представлений для ядер и приближенного вычисления операторов  $\mathcal{P}^{(D)}$  и  $\mathcal{Q}^{(D)}$ . Ясно, что объемы вычислений на каждом шаге разностной схемы определяются сложностью сверточного оператора  $\mathcal{P}^{(D)}$  и при различных рассматриваемых тензорных аппроксима-

циях составляют  $O(DRN \log N)$ ,  $O(DR^D N \log N)$  или  $O(DR^2 N \log N)$  арифметических операций. Указанные сложности соответствуют аппроксимациям массивов кинетических коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(d)}$  для  $2 \leq d \leq D$  каноническим разложением, разложением Таккера и тензорным поездом.

Важно отметить, что в частном случае  $D = 3$  использование формата Таккера может показаться более уместным, чем ТТ-разложения. Например, для хранения тензорного поезда необходимо задействовать  $O(3R^2N)$  ячеек памяти, а представление Таккера требует всего  $O(R^3 + 3RN)$ . Кроме того для трехмерных тензоров часто используемые в приложениях операции в формате Таккера оказываются более выгодными, чем в ТТ-представлении (например, вычисление суммы всех элементов, и т. д.). Во избежание ошибочного впечатления, что сложность использования разложения Таккера специально умалчивается в работе приводятся в том числе и алгоритмы 2 и 5 вычисления операторов сдвинутой итерированной свертки  $\mathcal{P}^{(D)}$  и итерированного умножения на вектор  $\mathcal{Q}^{(D)}$  в указанном формате. Данные алгоритмы наглядно демонстрируют, что применение разложения Таккера для решения рассматриваемой задачи многочастичной агрегации при любом  $D > 2$  представляется неэффективным.

Таким образом, с учетом таблицы 1 мы можем заключить, что для эффективной организации вычислений в разностной схеме (1.5) для задачи многочастичной агрегации лучше использовать СР-разложения, если таковые удалось получить. В противном случае для аппроксимаций ядер предпочтительно применение ТТ-разложений, так как известны надежные методы их построения. В то же время, поскольку число физически релевантных классов ядер невелико, то построение их хороших приближений в виде суммы одноранговых тензоров является отдельной важной задачей. Эта задача не решается в рамках данной работы и может рассматриваться как перспективное направление будущих исследований.

Таблица 2: Сложности операций для различных тензорных представлений  $D$ -мерного массива размера  $N \times N \times \dots \times N$  канонического ранга  $R$ .

Разложение	Сложность аппроксимации	Сложность вычисления оператора $\mathcal{P}^{(D)}$	Сложность вычисления оператора $\mathcal{Q}^{(D)}$
Каноническое (СР)	Сложность итерации: $O(R^3 + R^2N)$	$O(DRN \log N)$	$O(DRN)$
Таккера	$O(R^D N)$	$O(DR^D N \log N)$	$O(DR^{D-1} + R^D + DRN)$
Тензорный поезд (ТТ)	$O(DR^3 N)$	$O(DR^2 N \log N)$	$O(DR^2 N)$



### 3.2.4 Параллельная реализация вычислений с использованием тензорного поезда

В предыдущем подразделе было отмечено, что представление ядра  $\mathfrak{C}^{(D)}$  в виде приближенного ГТ-разложения является наиболее предпочтительным в общем случае. Тем не менее, даже использования тензорных разложений может быть недостаточно для расчетов реальных физических задач. Физически-осмысленные ядра зачастую обладают сверхлинейным ростом на бесконечности, что влечет за собой необходимость выбирать достаточно малый шаг по времени в разностных схемах (см. главу 2). Последний факт вкупе с большой размерностью задачи многочастичной агрегации и большим значением  $T$  требуемого реального времени расчета приводит к огромному объему необходимых вычислений. В связи с этим в настоящем подразделе приводятся параллельные реализации алгоритмов 3 и 6 эффективной организации вычислений для оператора  $\mathcal{S}^{(D)}$ , основанных на применении ГТ-разложения. Использование данных алгоритмов позволяет значительно сократить время расчетов при численном решении задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации.

Предположим, что для проведения расчетов нам доступны  $P$  процессоров. Для простоты изложения будем считать, что количество рассматриваемых уравнений  $N$  делится на величину  $P$  без остатка. Нам потребуется следующее обозначение для оператора извлечения  $p$ -ого блока заданного вектора  $\mathbf{a}_N = [a_1, a_2, \dots, a_N]^T$ :

$$\{\mathbf{a}_N\}_p := [a_{(p-1)N/P+1}, a_{(p-1)N/P+2}, \dots, a_{pN/P}]^T, \quad 1 \leq p \leq P.$$

При помощи введенного обозначения мы можем указать блоки  $\mathfrak{H}^{(\lambda,p)}$  факторов  $\mathfrak{H}^{(\lambda)}$  ГТ-аппроксимации тензора  $\mathfrak{C}^{(D)}$ , которые будут использоваться на соответствующем процессоре с номером  $p$  для  $1 \leq p \leq P$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} &:= [H_{r_{\lambda-1}, 1, r_\lambda}^{(\lambda)}, H_{r_{\lambda-1}, 2, r_\lambda}^{(\lambda)}, \dots, H_{r_{\lambda-1}, N, r_\lambda}^{(\lambda)}]^T \in \mathbb{R}^N, \\ \mathbf{H}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)} &:= \left[ \left\{ \mathbf{h}_{1, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p, \left\{ \mathbf{h}_{2, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p, \dots, \left\{ \mathbf{h}_{R_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p \right]^T \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N/P}, \\ \mathfrak{H}^{(\lambda,p)} &:= \left[ \left\{ \mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p \right] \equiv [\mathbf{H}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)}] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N/P \times R_\lambda}. \end{aligned}$$

Ниже представлены параллельные алгоритмы 7 и 8 вычисления сдвинутой итерированной дискретной свертки  $\mathcal{P}^{(D)}$  и итерированного умножения на вектор  $\mathcal{Q}^{(D)}$ . За исключением нескольких явно указанных коллективных операций, каждый процессор с номером  $p$  в данных алгоритмах оперируют только соответствующими блоками  $\mathfrak{H}^{(\lambda,p)}$  факторов аппроксимации ядра  $\mathfrak{C}^{(D)}$  тензорным поездом и блоками  $\{\mathbf{n}_N\}_p$  вектора концентраций. В алгоритме 7 используется коллективная операция параллельной дискретной свертки двух массивов, которая при заданном разбиении факторов и вектора концен-

траций  $\mathbf{n}_N$  на блоки может быть реализована при помощи параллельной версии быстрого дискретного преобразования Фурье. Реализация параллельной версии алгоритма быстрого преобразования Фурье присутствует, например, в библиотеке Intel MKL.

В следующей главе 4 приводятся результаты численных экспериментов, подтверждающие достаточно хорошую масштабируемость разработанных параллельных алгоритмов для численного решения задачи Коши многочастичной агрегации (1.5).

---

**Алгоритм 7.** Параллельное вычисление оператора  $\mathcal{P}^{(D)}$  в точке  $\mathbf{n}_N$ .

---

**Вход:** Блоки  $\mathfrak{H}^{(\lambda,p)} = \left[ \left\{ \mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p \right] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N/P \times R_\lambda}$  факторов приближенного ТТ-разложения тензора  $\mathfrak{C}^{(D)}$ , где  $\left\{ \mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p \in \mathbb{R}^{N/P}$ ; блок вектора концентраций  $\{\mathbf{n}_N\}_p \in \mathbb{R}^{N/P}$ .

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

---

- 1: **Функция** ПАРАЛЛЕЛЬНАЯ ТТ-СВЕРТКА  $\left( \mathfrak{H}^{(1,p)}, \mathfrak{H}^{(2,p)}, \dots, \mathfrak{H}^{(D,p)}, \{\mathbf{n}_N\}_p \right)$
  - 2: **Для каждого**  $r_{D-1} \leftarrow 1, 2, \dots, R_{D-1}$  **выполнить**
  - 3:  $\left\{ \mathbf{x}_{r_{D-1}}^{(D-1)} \right\}_p \leftarrow \left\{ \mathbf{h}_{r_{D-1}, 1}^{(D)} \right\}_p \circ \{\mathbf{n}_N\}_p$  ▷ Поэлементное умножение
  - 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:  $\left\{ \mathbf{x}_{r_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \right\}_p \leftarrow \mathbf{0}$
  - 8: **Для каждого**  $r_\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, R_\lambda$  **выполнить**
  - 9:  $\{\mathbf{y}\}_p \leftarrow \left\{ \mathbf{h}_{r_{\lambda-1}, r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p \circ \{\mathbf{n}_N\}_p$  ▷ Поэлементное умножение
  - 10:  $\{\mathbf{y}\}_p \leftarrow \left\{ \mathbf{x}_{r_\lambda}^{(\lambda)} \right\}_p * \{\mathbf{y}\}_p$  ▷ Параллельная дискретная свертка  
▷ Коллективное взаимодействие всех процессоров
  - 11:  $\left\{ \mathbf{x}_{r_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \right\}_p \leftarrow \left\{ \mathbf{x}_{r_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \right\}_p + \{\mathbf{y}\}_p$
  - 12: **Конец цикла**
  - 13: **Конец цикла**
  - 14: **Конец цикла**
  - 15:  $\left\{ \mathbf{x}_1^{(0)} \right\}_p \leftarrow \frac{1}{D!} \cdot \left\{ \mathbf{x}_1^{(0)} \right\}_p$
  - 16: **Логический сдвиг вектора**  $\mathbf{x}_1^{(0)}$  **на**  $D-1$  **позицию вправо**  
▷ Пересылки по  $D-1$  компоненте между процессорами с соседними номерами  $p$
  - 17: **Возвратить**  $\left\{ \mathbf{x}_1^{(0)} \right\}_p$
  - 18: **Конец функции**
-

---

**Алгоритм 8.** Параллельное вычисление оператора  $\mathcal{Q}^{(D)}$  в точке  $\mathbf{n}_N$ .

---

**Вход:** Блоки  $\mathfrak{H}^{(\lambda,p)} = \left[ \mathbf{H}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)} \right] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N/P \times R_\lambda}$  факторов приближенного ТТ-разложения тензора  $\mathfrak{C}^{(D)}$ , где  $\mathbf{H}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)} \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N/P}$ ; блок вектора концентраций  $\{\mathbf{n}_N\}_p \in \mathbb{R}^{N/P}$ .

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

---

- 1: **Функция** ПАРАЛЛЕЛЬНОЕ ТТ-УМНОЖЕНИЕ  $\left( \mathfrak{H}^{(1,p)}, \mathfrak{H}^{(2,p)}, \dots, \mathfrak{H}^{(D,p)}, \{\mathbf{n}_N\}_p \right)$
- 2:  $\mathbf{y}_D \leftarrow \mathbf{1}$
- 3: **Для каждого**  $\lambda \leftarrow D, D-1, \dots, 2$  **выполнить**
- 4:     **Для каждого**  $r_\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, R_\lambda$  **выполнить**
- 5:          $\mathbf{z}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)} \leftarrow \mathbf{H}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)} \{\mathbf{n}_N\}_p$  ▷ Умножение матрицы на вектор
- 6:          $\mathbf{z}_{r_\lambda}^{(\lambda,p)} \leftarrow \sum_{q=1}^P \mathbf{z}_{r_\lambda}^{(\lambda,q)}$  ▷ Редукция по сумме
- ▷ Коллективное взаимодействие всех процессоров
- 7:     **Конец цикла**
- 8:      $\mathbf{y}_{\lambda-1} \leftarrow \left[ \mathbf{z}_1^{(\lambda,p)}, \mathbf{z}_2^{(\lambda,p)}, \dots, \mathbf{z}_{R_\lambda}^{(\lambda,p)} \right] \mathbf{y}_\lambda$  ▷ Умножение матрицы на вектор
- 9:     **Конец цикла**
- 10:  $\mathbf{x} \leftarrow -\frac{1}{(D-1)!} \mathfrak{H}^{(1,p)} \mathbf{y}_1$  ▷ Умножение матрицы на вектор
- 11:  $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} \circ \{\mathbf{n}_N\}_p$  ▷ Поэлементное умножение
- 12: **Возвратить**  $\mathbf{x}$
- 13: **Конец функции**

---

Отметим, что возможна и другая схема распараллеливания алгоритмов 3 и 6. В этом случае разбиение факторов  $\mathfrak{H}^{(\lambda,p)}$  на блоки просходит по паре ранговых размерностей  $r_{\lambda-1}$  и  $r_\lambda$ . Преимуществами такого метода являются отсутствие необходимости разбивать вектор концентраций вдоль модовой размерности (по  $N$ ) и, как следствие, необходимости в использовании параллельной реализации быстрого дискретного преобразования Фурье. Существенным минусом такого способа параллелизации является сложность в работе с разбиениями факторов, что обусловлено достаточно сильным отличием пар рангов  $R_{\lambda-1}$  и  $R_\lambda$  при различных  $1 \leq \lambda \leq D$ . Другим недостатком приведенной схемы распараллеливания является отсутствие зависимости объема данных, который составляет  $O(RN)$ , от количества задействованных процессоров  $P$  при коллективных пересылках между ними. Следствием данных недостатков является низкая масштабируемость такого метода параллелизации.

### 3.3 Оценки тензорных рангов для некоторых классов массивов кинетических коэффициентов

В настоящем разделе мы приводим оценки на тензорные ранги для модельных массивов кинетических коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(D)}$ , при произвольном  $D$ , каждого из следующих трех

ТИПОВ

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv c, \quad c \geq 0; \quad (3.12)$$

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}, \quad \left| \sum_{\lambda=1}^D \mu_{\lambda} \right| < 1; \quad (3.13)$$

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = |\mathbf{i}_D|^{\alpha}, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (3.14)$$

Сумма в формуле (3.13) предполагается по всем перестановкам

$$\sigma: \{1, 2, \dots, D\} \rightarrow \{1, 2, \dots, D\}.$$

Тензоры, определяемые элементами вида (3.12)–(3.14), будем соответственно называть «постоянным» ядром, ядром «обобщенного умножения» и ядром «обобщенного сложения».

Кроме того, оценки тензорных рангов приводятся для следующих ядер коагуляции, при  $D = 2, 3$ , используемых при моделировании реальных физических процессов агрегации вещества (в частности, при катализе металлических наночастиц):

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} = (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2})^2 \sqrt{\frac{i_1 + i_2}{i_1 i_2}}; \quad (3.15)$$

$$C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sqrt{\frac{i_1 + i_2 + i_3}{i_1 i_2 i_3}} \cdot (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2} + \sqrt[3]{i_3})^2 \cdot \left[ (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2})^3 \sqrt{\frac{i_1 i_2}{i_1 + i_2}} + (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_3})^3 \sqrt{\frac{i_1 i_3}{i_1 + i_3}} + (\sqrt[3]{i_2} + \sqrt[3]{i_3})^3 \sqrt{\frac{i_2 i_3}{i_2 + i_3}} \right]. \quad (3.16)$$

Вид коэффициентов (3.15) общеизвестен, соответствующее ядро принято называть баллистическим. Ядро с элементами (3.16) может считаться обобщением баллистического ядра на случай трехчастичных столкновений. В данном случае соответствующие кинетические коэффициенты выведены по аналогии с бинарными из соображений симметрии.

Как уже было сказано в разделе 3.2, величина тензорных рангов ядра определяет сложность выполнения шага схемы (1.5). Хотя для тензоров (3.14)–(3.16) неизвестны соответствующие точные канонические разложения, ниже будет показано, что и канонический и все ТТ-ранги аппроксимаций для всех перечисленных ядер, задаваемых элементами (3.12)–(3.16), достаточно малы при разумных ограничениях на размеры ядра  $N$  и погрешность аппроксимации  $\varepsilon$ . Важно отметить, что оценки на ранги, которые будут приведены в настоящем параграфе, подтверждаются результатами численных расчетов из следующей главы 4.

### 3.3.1 Оценки рангов для постоянного ядра

При любом значении  $D$  тривиальным образом проверяется, что для массива постоянных кинетических коэффициентов (3.12) может быть построено точное каноническое разложение ранга 1 и точное ГТ-разложение, все ранги которого равны 1.

### 3.3.2 Оценки рангов для ядра обобщенного умножения

Ядро с элементами (3.13) уже представлено в виде разложения канонического ранга  $D!$ . Последнее значение растёт очень быстро с увеличением  $D$ , что, однако, не вызывает затруднений при использовании ядра обобщенного умножения в расчетах благодаря следующему факту. Для вычисления операторов итерированной свертки и умножения на вектор по алгоритмам 1 и 4 нет необходимости использовать само ядро с элементами (3.13). Достаточно заметить, что результаты работы указанных алгоритмов для ядра обобщенного умножения совпадают с умноженными на  $D!$  соответствующими результатами для «упрощенного» ядра с элементами вида  $i_1^{\mu_1} \cdot i_2^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_D^{\mu_D}$ . При этом очевидно, что упрощенное ядро имеет канонический ранг 1.

Далее, для ядра обобщенного умножения, задаваемого элементами (3.13), можно также указать оценки и на ранги его представления в виде тензорного произведения. А именно имеет место оценка

$$\max\{R_\lambda: 0 \leq \lambda \leq D\} = \binom{D}{\lceil D/2 \rceil} \equiv O(2^D/\sqrt{D}),$$

что обосновывает следующая

**Теорема 5.** *При заданных вещественных параметрах  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_D$  для ГТ-рангов  $R_\lambda$   $D$ -мерного тензора размера  $N \times N \times \dots \times N$  с элементами следующего вида*

$$C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv C_{\mathbf{i}_D}^{(D)}[\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_D] = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D} \quad (3.17)$$

выполнены ограничения

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

*Доказательство.* Введем обозначения  $R_\lambda := \binom{D}{\lambda}$  для  $0 \leq \lambda \leq D$ . Для доказательства теоремы достаточно предъявить ГТ-разложение тензора с элементами вида (3.17), обладающее рангами  $R_\lambda$ .

Далее предполагается, что при каждом значении  $1 \leq \lambda \leq D$  зафиксировано какое-либо взаимнооднозначное соответствие  $r_\lambda \rightarrow (r_{1,\lambda}, r_{2,\lambda}, \dots, r_{\lambda,\lambda})$  между элементами сле-

дующих конечных множеств

$$\{r_\lambda \in \mathbb{N}: 1 \leq r_\lambda \leq R_\lambda\},$$

$$\{(r_{1,\lambda}, r_{2,\lambda}, \dots, r_{\lambda,\lambda}) \in \mathbb{N}^\lambda: 1 \leq r_{1,\lambda} < r_{2,\lambda} < \dots < r_{\lambda,\lambda} \leq D\}.$$

Такое соответствие всегда можно указать в силу совпадения мощностей приведенных множеств.

Заметим, что при всех  $1 \leq \lambda \leq D - 1$  нетрудно проверяется следующее тождество

$$C_{i_{\lambda+1}}^{(\lambda+1)}[\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{\lambda+1}] \equiv \sum_{\xi=1}^{\lambda+1} C_{i_\lambda}^{(\lambda)}[\mu_1, \dots, \mu_{\xi-1}, \mu_{\xi+1}, \dots, \mu_{\lambda+1}] \cdot i_{\lambda+1}^{\mu_\xi}. \quad (3.18)$$

С помощью последнего соотношения ниже будет показано по индукции, что всегда можно выбрать величины  $H_{r_{\tau-1}, i_\tau, r_\tau}^{(\tau)}$  так, чтобы для каждого  $1 \leq \lambda \leq D$  выполнялись тождества

$$\sum_{r_0, r_1, \dots, r_{\lambda-1}} H_{r_0, i_1, r_1}^{(1)} \cdot H_{r_1, i_2, r_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot H_{r_{\lambda-1}, i_\lambda, r_\lambda}^{(\lambda)} = C_{i_\lambda}^{(\lambda)}[\mu_{r_{1,\lambda}}, \mu_{r_{2,\lambda}}, \dots, \mu_{r_{\lambda,\lambda}}], \quad (3.19)$$

$$r_0 = 1, \quad 1 \leq i_\tau \leq N, \quad 1 \leq r_\tau \leq R_\tau, \quad 1 \leq \tau \leq \lambda.$$

Соотношение (3.19) при  $\lambda = D$  дает требуемое равенство для искомого ТТ-разложения тензора (3.17).

База индукции проверяется тривиальным образом, если взять

$$H_{r_0, i_1, r_1}^{(1)} := C_{i_1}^{(1)}[\mu_{r_1}] \equiv i_1^{\mu_{r_1}}, \quad 1 \leq i_1 \leq N, \quad 1 \leq r_1 \leq R_1.$$

Далее, коэффициенты (3.17) для  $D = 2, 3$  перепишем в следующем виде

$$C_{i_1, i_2}^{(2)}[\mu_1, \mu_2] \equiv \begin{bmatrix} i_1^{\mu_1} & i_1^{\mu_2} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} i_2^{\mu_2} \\ i_2^{\mu_1} \end{bmatrix};$$

$$C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}[\mu_1, \mu_2, \mu_3] \equiv \begin{bmatrix} i_1^{\mu_1} & i_1^{\mu_2} & i_1^{\mu_3} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & i_2^{\mu_3} & i_2^{\mu_2} \\ i_2^{\mu_3} & 0 & i_2^{\mu_1} \\ i_2^{\mu_2} & i_2^{\mu_1} & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} i_3^{\mu_1} \\ i_3^{\mu_2} \\ i_3^{\mu_3} \end{bmatrix}.$$

Отсюда ясна закономерность выбора факторы  $H^{(\tau)}$  для произвольного  $\tau$ . Если равенство (3.19) уже доказано для некоторого  $\lambda$ , то достаточно взять

$$H_{r_\lambda, i_{\lambda+1}, r_{\lambda+1}}^{(\lambda+1)} := \begin{cases} i_{\lambda+1}^{\mu_{r_\lambda, \lambda+1}}, & \{r_{\xi, \lambda+1}\} \cup \{r_{\phi, \lambda}: 1 \leq \phi \leq \lambda\} = \{r_{\psi, \lambda+1}: 1 \leq \psi \leq \lambda+1\}, \\ 0, & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$1 \leq r_\lambda \leq R_\lambda, \quad 1 \leq i_{\lambda+1} \leq N, \quad 1 \leq r_{\lambda+1} \leq R_{\lambda+1}.$$

Благодаря указанному выбору при всех  $1 \leq i_1, i_2, \dots, i_{\lambda+1} \leq N$  и  $1 \leq r_{\lambda+1} \leq R_{\lambda+1}$  справедливо равенство

$$\begin{aligned} & \sum_{r_\lambda=1}^{R_\lambda} C_{\mathbf{i}_\lambda}^{(\lambda)} [\mu_{r_1, \lambda}, \mu_{r_2, \lambda}, \dots, \mu_{r_\lambda, \lambda}] \cdot H_{r_\lambda, i_{\lambda+1}, r_{\lambda+1}}^{(\lambda+1)} = \\ & = \sum_{\xi=1}^{\lambda+1} C_{\mathbf{i}_\lambda}^{(\lambda)} [\mu_{r_1, \lambda+1}, \dots, \mu_{r_{\xi-1}, \lambda+1}, \mu_{r_\xi+1, \lambda+1}, \dots, \mu_{r_{\lambda+1}, \lambda+1}] \cdot i_{\lambda+1}^{\mu_{r_\xi, \lambda+1}}. \end{aligned}$$

Таким образом, для обоснования шага индукции остается лишь воспользоваться тождеством (3.18), в котором вместо соответствующих значений  $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{\lambda+1}$  необходимо взять  $\mu_{r_1, \lambda+1}, \mu_{r_2, \lambda+1}, \dots, \mu_{r_{\lambda+1}, \lambda+1}$ . Теорема доказана.  $\square$

Отметим, что построенное в последней теореме ТТ-разложение для ядра обобщенного умножения является разреженным. Последнее означает, что количество вычислений с таким тензорным разложением может быть значительно уменьшено.

### 3.3.3 Оценки рангов для ядра обобщенного сложения

В данном подразделе приводятся оценки тензорных рангов для ядра обобщенного сложения, определяемого элементами (3.14). К сожалению, для указанного тензора неизвестен канонический ранг и соответствующее точное каноническое разложение. Однако можно указать оценки на ранг тензора, аппроксимирующего ядро (3.14) с произвольной заданной наперед точностью. Для этого мы воспользуемся следующей вспомогательной теоремой, доказательство которой можно найти в работе [71].

**Теорема 6.** *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*

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

Следствием данной теоремы является

**Теорема 7.** *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  $\varepsilon$  каноническим разложением ранга  $DM$ , где  $M = O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log DN)$ .*

*Доказательство.* Для доказательства теоремы будем использовать очевидное тождество  $|\mathbf{i}_D|^\alpha \equiv |\mathbf{i}_D|^{\alpha-1} \cdot |\mathbf{i}_D|$ . Здесь величину  $|\mathbf{i}_D|^{\alpha-1}$  можно аппроксимировать при помощи

теоремы 6 для  $k = |\mathbf{i}_D|$  и  $\beta = 1 - \alpha$ . Таким образом, справедлива цепочка соотношений

$$\begin{aligned} |\mathbf{i}_D|^\alpha &\equiv |\mathbf{i}_D|^{\alpha-1} \cdot |\mathbf{i}_D| \approx \sum_{\mu=1}^M w_\mu e^{-s_\mu |\mathbf{i}_D|} \cdot |\mathbf{i}_D| \equiv \\ &\equiv \sum_{\lambda=1}^D \sum_{\mu=1}^M i_\lambda w_\mu \cdot e^{-s_\mu i_1} \cdot e^{-s_\mu i_2} \cdot \dots \cdot e^{-s_\mu i_D}. \end{aligned}$$

Теорема доказана. □

Для аппроксимации ядра с элементами (3.14) каноническим разложением, полученной в последней теореме, немедленно следуют оценки на ранги ее представления в виде тензорного произведения (см. подраздел 3.1.6).

### 3.3.4 Оценки рангов для баллистического ядра и его трехчастичного обобщения

Как для баллистического ядра с элементами (3.15), так и для его эмпирического трехчастичного обобщения с элементами (3.16) неизвестно точное значение канонического ранга и соответствующее каноническое разложение. Однако каждую из дискретных функций

$$1/\sqrt{i_1 + i_2}, \quad \sqrt{i_1 + i_2}, \quad \sqrt{i_1 + i_2 + i_3}, \quad 1 \leq i_1, i_2, i_3 \leq N$$

всегда можно аппроксимировать с фиксированной погрешностью  $\varepsilon$  по фробениусовой норме каноническими разложениями ранга  $O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log N)$ . Последнее следует из приведенных теорем 6 (для  $k = i_1 + i_2$ ,  $\beta = 1/2$ ) и 7 (для  $D = 2, 3$  и  $\alpha = 1/2$ ).

Из указанного замечания тривиальным образом следует оценка  $O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log N)$  на канонический и ТТ-ранги для аппроксимации тензоров с элементами вида (3.15) и (3.16). Необходимо отметить, что аналогичные оценки для баллистического ядра были получены в работе [20].



## Глава 4

# Численные эксперименты

В данной главе излагается описание программного комплекса, реализующего разработанные в настоящей работе эффективные алгоритмы организации вычислений в схеме предиктор-корректор (1.5) для приближенного решения задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского. Также в главе приводятся результаты численных экспериментов, проведенных с применением рассматриваемого комплекса. В частности, производительность разработанных методов, задействующих тензорные разложения для ускорения вычислений в схеме предиктор-корректор, продемонстрирована в сравнении с наивной реализацией разностной схемы. Кроме того, представлены результаты тестирования параллельной версии алгоритмов вычисления операторов многочастичной агрегации  $\mathcal{S}^{(d)}$ . Необходимость такой параллелизации вызвана сложностью и большим временем вычисления указанных операторов.

В главе приводятся результаты численного моделирования для ряда модельных задач, в том числе и для задачи Коши, описывающей физический процесс трехчастичной агрегации металлических наночастиц. Таким образом, показывается, что разработанные алгоритмы эффективны при решении практических задач математического моделирования.

### 4.1 Описание программного комплекса для задачи многочастичной агрегации

В настоящем разделе описывается комплекс программ, разработанных для численного решения задачи Коши для многочастичных уравнений агрегации. Комплекс содержит отдельные программные модули, реализующие представленные в главе 3 последовательные алгоритмы эффективных вычислений в схеме (1.5) с использованием канонического и ГТ-разложения, а также параллельные алгоритмы, основанные на применении тензорного разложения. Кроме того, в комплексе присутствуют программные компоненты, необходимые для построения малоранговых ГТ-аппроксимаций массивов кинетических

коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(d)}$ . Программный комплекс размещён в репозитории с использованием системы контроля версий *Git* по адресу <https://bitbucket.org/sumvorax/gsmoluch>. Краткое описание базовых директорий программного комплекса приведено в таблице 1.

Таблица 1: Описание директорий с модулями программного комплекса.

Директория	Содержащиеся модули
libcp	Директория с реализацией итерированных операторов свертки $\mathcal{P}^{(D)}$ и умножения на вектор $\mathcal{Q}^{(D)}$ , основанных на представлении ядра в виде канонического разложения
libtt	Директория с реализацией методов малоранговой аппроксимации ядра ТТ-разложением и реализациями итерированных операторов свертки $\mathcal{P}^{(D)}$ и умножения на вектор $\mathcal{Q}^{(D)}$ , основанных на таком представлении ядра
solvers	Директория с программными модулями для численного решения задачи Коши для системы многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского, реализующими алгоритмы ускорения схемы предиктор-корректор

В каждом из модулей необходимо задать начальное условие и функцию локального вычисления кинетических коэффициентов. При запуске без указания параметров каждый программный модуль печатает пользовательское сообщение с перечнем необходимых входных параметров рассматриваемой модели и алгоритма. Краткое описание программных модулей, реализующих алгоритмы решения многочастичных уравнений типа уравнений Смолуховского, приведено в таблице 2. Все модули реализованы на языке *C++*.

Таблица 2: Описание модулей программного комплекса с реализацией численных алгоритмов решения задачи Коши для многочастичных уравнений.

Расположение	Имя	Содержание
solvers/	gsmol_cp.cpp	Модуль программной реализации эффективного метода решения задачи Коши для многочастичных уравнений типа уравнений Смолуховского, задействующей предопределенные канонические разложения для представления ядер
solvers/	gsmol_tt.cpp	Модуль программной реализации эффективного метода решения задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского, задействующей ТТ-аппроксимации для представления ядер
solvers/	gsmol_tt_mpi.cpp	Модуль параллельной программной реализации эффективного метода решения задачи Коши для многочастичных кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского, задействующей ТТ-аппроксимации для представления ядер

Программный комплекс разработан для компиляции при помощи оптимизирующих компиляторов *Intel* с использованием технологии *OpenMP* и *MPI*, а также программных библиотек *MKL* и *VSL*. 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 экспериментов в случае трехчастичной агрегации

В данном разделе приводятся результаты численных экспериментов для разностной схемы предиктор-корректор (1.5) для задачи Коши системы (1.1) многочастичных кинетических уравнений типа уравнений Смолуховского для  $D = 3$ , допускающей как бинарные, так и тернарные столкновения частиц. В качестве начальных условий были выбраны монодисперсные  $n_k(0) = \delta_{1,k}$ . Для расчетов использовались предопределенные канонические разложения тестовых массивов кинетических коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(d)}$

следующих двух типов

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 1, \quad C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1; \quad (4.1)$$

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} = i_1^{\mu_1} \cdot i_2^{\mu_2} + i_1^{\mu_2} \cdot i_2^{\mu_1}, \quad C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot i_{\sigma(3)}^{\mu_3}, \quad (4.2)$$

$$\mu_1 = 0.35, \quad \mu_2 = 0.25, \quad \mu_3 = 0.15.$$

В последней формуле из (4.2) подразумевается сумма по всем перестановкам индексов  $\sigma: \{1, 2, 3\} \rightarrow \{1, 2, 3\}$ . Наряду с общей схемой для каждого из случаев (4.1) и (4.2) были рассмотрены аналогичные двухчастичная и трехчастичная схемы, соответствующие системе уравнений (1.3) при  $D = 2, 3$ , соответственно.

В разделе сравнивается производительность наивного и предложенного эффективного методов организации вычислений в схеме предиктор-корректор при различном количестве задействованных уравнений. Также сравнивается численное решение трехчастичной (при  $D = 3$ ) задачи Коши (1.2), (1.3) с известным аналитическим решением для постоянных кинетических коэффициентов. Кроме того исследуется связь закона сохранения общей массы системы с количеством рассматриваемых уравнений при растущем времени расчета. Помимо всего перечисленного выше для нас представляет интерес зависимость профиля решения задачи Коши от типа рассматриваемого ядра.

Все расчеты, описываемые в настоящем разделе, были выполнены на персональном компьютере (4-ядерный процессор Intel Core i5-4210U CPU@1.77 ГГц). Замеры времени указаны без учета предподсчета массивов кинетических коэффициентов.

В таблице 3 представлены измерения времен расчета для наивной и эффективной реализаций схемы предиктор-корректор, при учете только тройных столкновений агрегатов. Указанные измерения подтверждают эффективность предложенной реализации схемы. Для наивной реализации видна зависимость  $O(N^3)$  времени расчета от количества уравнений  $N$ .

Таблица 3: Сравнение времен расчета для схемы предиктор-корректор при наивной и эффективной реализации в зависимости от числа уравнений. Численное решение рассчитано для задачи Коши, определяемой кинетическими коэффициентами  $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 0$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$  и начальными условиями  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ , при шаге  $\Delta t = 0.01$  и числе итераций  $T = 10$ .

Число уравнений $N$	Наивная реализация, сек.	Эффективная реализация, сек.
$2^{11}$	144.75	0.0122
$2^{12}$	1131.50	0.0224
$2^{13}$	9002.03	0.0551

Таблица 4: Измерения времен расчета для эффективных реализаций трех разностных схем в зависимости от типа допустимых столкновений частиц с соответствующими постоянными кинетическими коэффициентами и начальными условиями  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$  при шаге  $\Delta t = 0.01$  и числе итераций  $T = 100$ .

Число уравнений $N$	Двухчастичная схема, сек	Трехчастичная схема, сек	Схема, учитывающая оба типа столкновений, сек
$2^{14}$	0.329	0.424	0.746
$2^{15}$	0.702	0.851	1.624
$2^{16}$	1.427	1.758	3.197
$2^{17}$	3.058	3.888	6.772
$2^{18}$	7.697	8.660	16.468

Таблица 5: Измерения относительной погрешности аппроксимации полной концентрации агрегатов в зависимости от времени для трехчастичной задачи Коши с постоянными кинетическими коэффициентами и начальными условиями  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ . Число уравнений  $N = 2^{14}$ , шаг  $\Delta t = 0.01$ .

Время $t$	Относительная погрешность аппроксимации полной концентрации агрегатов
1	$2.349 \cdot 10^{-6}$
10	$1.108 \cdot 10^{-6}$
100	$1.422 \cdot 10^{-7}$

В таблице 4 для постоянных ядер вида (4.1) и монодисперсных начальных условий  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$  представлены измерения времен расчета эффективных реализаций общей схемы предиктор-корректор и сопутствующих схем, допускающих только двойные либо только тройные столкновения агрегатов. В данном случае каждое из ядер  $\mathfrak{C}^{(d)}$  для  $d = 2, 3$  имеет ранг соответствующего разложения  $R = 1$ , причем факторы этих разложений одинаковы для обоих ядер. Однако общая схема реализована без учета таких совпадений, что характеризует ее время расчета как сумму времен для соответствующих схем, допускающих только один тип столкновений агрегатов. Измерения подтверждают зависимость  $O(RN \log N)$  времени расчета для каждой из трех рассматриваемых схем от количества уравнений  $N$ .

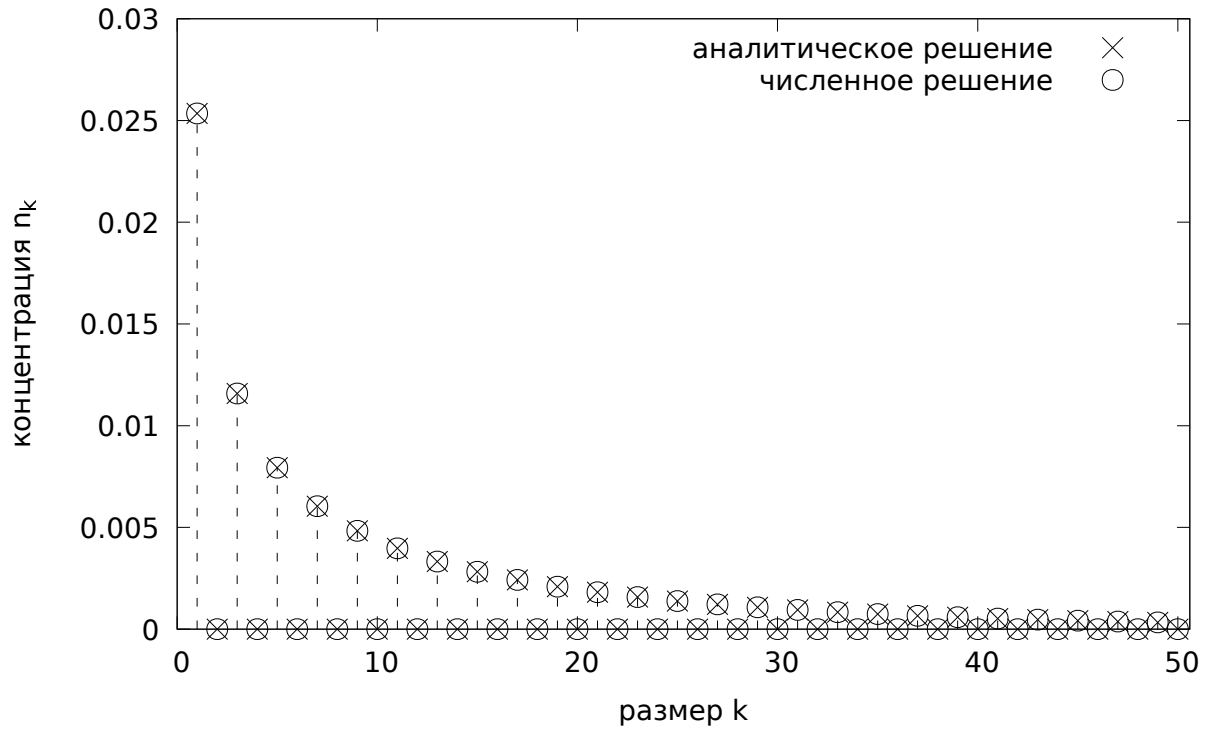


Рис. 1: Соответствие численного решения аналитическому (1.4) для трехчастичной задачи Коши при постоянных кинетических коэффициентах  $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 0$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$  и начальных условиях  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$  в момент времени  $t = 200$ . Расчет выполнен при числе уравнений  $N = 1000$  и шаге  $\Delta t = 0.01$ .

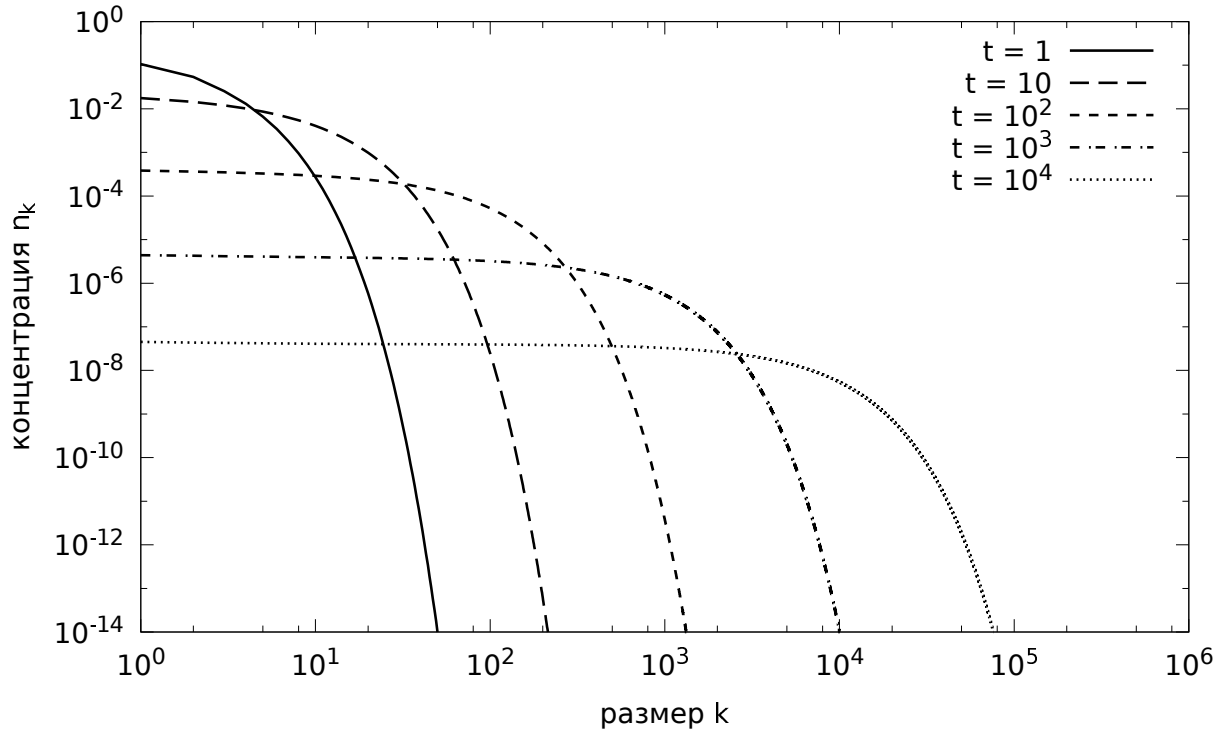


Рис. 2: Эволюция численного решения задачи Коши при постоянных кинетических коэффициентах  $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 1$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$  и начальных условиях  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$  в зависимости от времени  $t$ . Численное решение рассчитано при числе уравнений  $N = 2^{17}$  и шаге  $\Delta t = 0.01$ . Логарифмическая шкала по каждой из осей.

В таблице 5 приведены измерения относительной погрешности аппроксимации полной концентрации  $n(t)$  агрегатов в различные моменты времени  $t$  для задачи Коши с постоянными кинетическими коэффициентами  $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 0$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$  и монодисперсными начальными условиями  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ . Расчеты показали согласованность кластерной плотности численного решения и аналитического решения (1.4). На рисунке 1 продемонстрировано фактическое совпадение численного и аналитического решений трехчастичной задачи Коши с указанными кинетическими коэффициентами. Видно обнуление концентраций с четными коэффициентами  $n_{k=2s} = 0$ , обусловленное спецификой рассматриваемой задачи Коши и выбором начального условия.

На рисунке 2 показана эволюция численного решения общей задачи Коши с постоянными ядрами (4.1) в зависимости от времени  $t$ . Вид графиков решений означает, что для выполнения закона сохранения полной массы системы  $m(t) = m(0)$  при увеличении времени расчета  $t$  необходимо пропорционально увеличивать число задействованных уравнений. Коэффициент пропорциональности для рассматриваемых отрезков времени при постоянных ядрах приблизительно равен 1, однако в общем случае обусловлен ростом ядра.

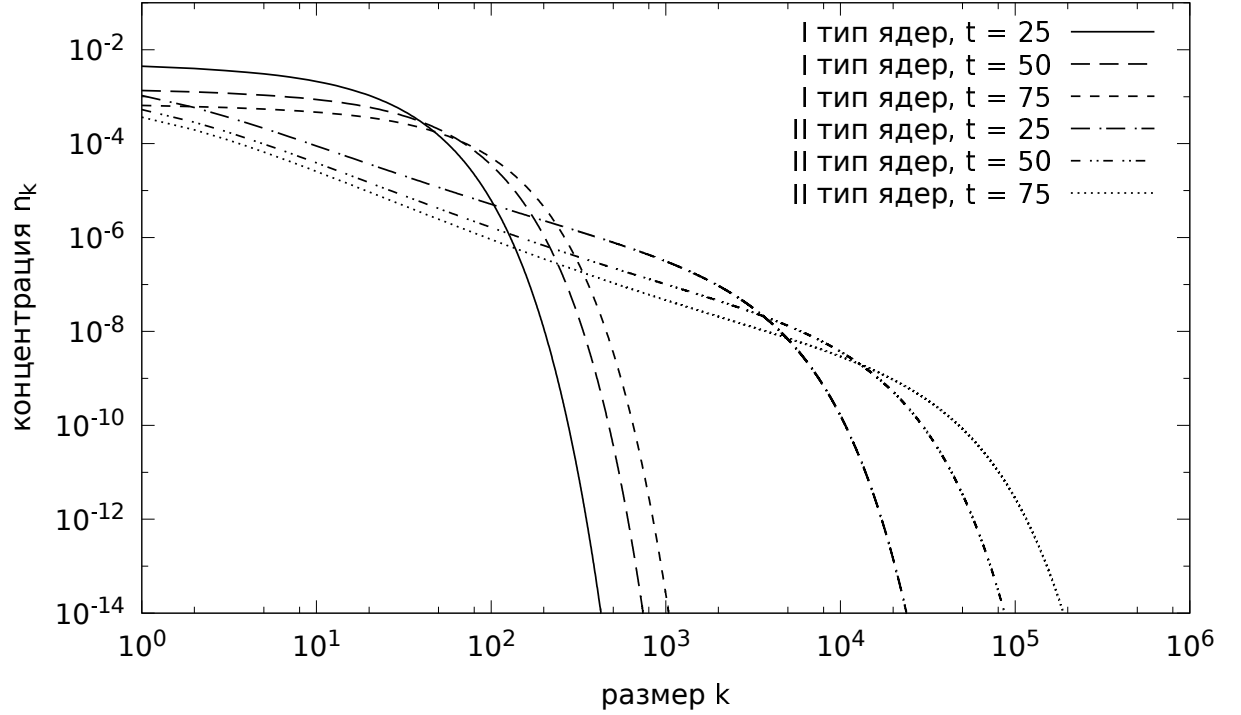


Рис. 3: Сравнение численных решений для общих задач Коши в зависимости от вида кинетических коэффициентов  $C_{i_1, i_2}^{(2)}$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)}$  при начальных условиях  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$  в моменты времени  $t = 25, 50, 75$ . Расчет выполнен при числе уравнений  $N = 262144$  и шаге  $\Delta t = 0.01$ . Логарифмическая шкала по каждой из осей. Кинетические коэффициенты задачи Коши определяются типом ядра: (I) постоянные ядра  $C_{i_1, i_2}^{(2)} \equiv 1$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} \equiv 1$ ; (II) ядра обобщенного умножения  $C_{i_1, i_2}^{(2)} = i_1^{0.35} \cdot i_2^{0.25} + i_1^{0.25} \cdot i_2^{0.35}$  и  $C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{0.35} \cdot i_{\sigma(2)}^{0.25} \cdot i_{\sigma(3)}^{0.15}$ .

На рисунке 3 представлены численные решения общих задач Коши для постоянных ядер (4.1) и так называемых ядер обобщенного умножения (4.2) в различные моменты времени  $t$ . На графиках решений заметно соответствие между ростом значений ядер, как функций от размеров взаимодействующих частиц, и количеством ненулевых концентраций. Последнее подтверждает необходимость задействовать большее число уравнений при большем росте рассматриваемого ядра для выполнения закона сохранения общей массы системы.

### 4.3 Результаты экспериментов в общем случае многочастичной агрегации

В данном разделе приводятся результаты численных экспериментов для реализаций разностной схемы предиктор-корректор (1.5) на основе тензорных разложений для задачи Коши системы кинетических уравнений (1.1) типа уравнений Смолуховского, до-



пускающей столкновения только  $D$  частиц при  $D = 2, 3, 4, 5$ . Кроме того, рассматриваются реализации для общей схемы, допускающей столкновения любого числа  $2 \leq d \leq D$  частиц. В качестве начальных условий были выбраны монодисперсные  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ . Следующие три типа тестовых массивов кинетических коэффициентов  $\mathfrak{C}^{(d)}$  использовались для расчетов

$$C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} \equiv 1; \quad (4.3)$$

$$C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(d)}^{\mu_d}, \quad \mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda, \quad 2 \leq \lambda \leq d; \quad (4.4)$$

$$C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} = |\mathbf{i}_d|^{\alpha}, \quad \alpha = 0.5. \quad (4.5)$$

Сумма в формуле (4.4) предполагается по всем перестановкам индексов

$$\sigma: \{1, 2, \dots, d\} \rightarrow \{1, 2, \dots, d\}.$$

Необходимо отметить, что СР и ТТ-реализации разностной схемы при  $D = 2$  эквивалентны в силу совпадения используемых разложений. Данный случай уже был рассмотрен в работах [20, 51]. Однако здесь для полноты описания рассматриваемых явлений приводятся результаты в том числе и для  $D = 2$ .

Для численных экспериментов применялись вычисления на основе ТТ-разложения. С целью проверки точности ТТ-аппроксимаций был также проведен ряд экспериментов с использованием точных СР-разложений ядер вида (4.3) и (4.4). Для каждого из двух типов ядер приводятся времена расчета для реализаций разностной схемы предиктор-корректор на основе рассматриваемых разложений. Также указывается время построения приближенного ТТ-разложения. При известном аналитическом решении в случае ядер (4.3), монодисперсных начальных условий и допустимых столкновений  $D$  частиц оценивается относительная погрешность полной концентрации агрегатов. Для ядер типа (4.4) оценивается относительная разность полной концентрации  $|n_{\text{СР}} - n_{\text{ТТ}}|/n_{\text{СР}}$  двух реализаций схемы. Кроме того, приводятся измерения ранга полученных ТТ-аппроксимаций для ядер вида (4.4) и (4.5). В данном разделе отсутствуют эксперименты с разложением Таккера, неэффективность которого для рассматриваемой задачи уже была показана в главе 2. Все расчеты раздела были выполнены на персональном компьютере (4-ядерный процессор Intel Core i5-330s CPU@2.70 ГГц).

Таблица 6: Сравнение времен расчета (в секундах) для реализаций схемы предиктор-корректор в зависимости от допустимого количества  $D$  частиц, участвующих в одном взаимодействии. Схемы построены на основе точного СР-разложения и приближенного ТТ-разложения ядра  $C^{(D)}$  вида: (I)  $C_{i_D}^{(D)} \equiv 1$ ; (II)  $C_{i_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$  (сумма по всем перестановкам  $\sigma$ ),  $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$ ,  $2 \leq \lambda \leq D$ . Для ТТ-реализаций приводятся измерения времен аппроксимации. В вычислениях СР-схемы для ядра типа (II) учитывалось только одно слагаемое разложения (в силу вида ядра). Начальные условия  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ , шаг  $\Delta t = 0.01$ , число итераций  $T = 100$ .

$D$	Тип ядра	(I) Постоянное			
	Число уравнений $N$	$2^{14}$	$2^{15}$	$2^{16}$	$2^{17}$
2	СР-схема	0.25	0.47	0.93	2.43
	ТТ-схема	0.75	1.61	3.62	8.27
	ТТ-аппроксимация	0.13	0.25	0.48	0.98
3	СР-схема	0.24	0.45	0.98	2.61
	ТТ-схема	1.43	3.08	7.11	15.54
	ТТ-аппроксимация	0.21	0.41	0.80	1.38
4	СР-схема	0.28	0.54	1.13	2.86
	ТТ-схема	2.12	4.58	10.06	23.00
	ТТ-аппроксимация	0.30	0.59	1.15	1.81
5	СР-схема	0.31	0.58	1.24	3.10
	ТТ-схема	2.80	5.91	13.04	29.99
	ТТ-аппроксимация	0.37	0.74	1.38	2.26

$D$	Тип ядра	(II) Обобщенного умножения			
	Число уравнений $N$	$2^{14}$	$2^{15}$	$2^{16}$	$2^{17}$
2	СР-схема	0.39	0.70	1.72	4.07
	ТТ-схема	0.89	2.18	4.85	12.65
	ТТ-аппроксимация	0.38	0.73	1.44	2.77
3	СР-схема	0.55	0.95	2.50	5.21
	ТТ-схема	4.53	11.30	29.46	77.59
	ТТ-аппроксимация	3.50	7.16	13.05	27.72
4	СР-схема	0.68	1.27	3.31	6.32
	ТТ-схема	16.24	47.28	128.4	331.6
	ТТ-аппроксимация	50.53	108.4	217.0	445.7
5	СР-схема	0.72	1.61	3.98	8.41
	ТТ-схема	55.17	166.4	451.6	1286.0
	ТТ-аппроксимация	976.1	2060.1	4082.0	8425.4

В таблице 6 приведены измерения времен расчета для СР и ТТ-реализаций схемы предиктор-корректор, допускающей только  $D$ -частичные столкновения агрегатов.

Схема построена для постоянных ядер вида (4.3) и ядер обобщенного умножения вида (4.4) при монодисперсных начальных условиях  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ . В данном случае каждое из ядер (4.3) задается точным каноническим разложением ранга  $R = 1$ . При этом максимальный ТТ-ранг для указанного ядра также равен 1. В формулах (4.4) ядра  $C^{(d)}$  формально представлены точными каноническими разложениями ранга  $d!$ . Однако, как уже было отмечено в главе 3, в силу вида фактор-матриц  $\mathbf{U}^{(\lambda)}$  нет необходимости использовать в вычислениях операторов  $\mathcal{P}^{(d)}$  и  $\mathcal{Q}^{(d)}$  более одного слагаемого для каждого из указанных разложений.

На рисунке 4 представлены измерения времен расчета для схемы на основе приближенного ТТ-разложения ядер вида (4.4), допускающей только  $D$ -частичные столкновения агрегатов. В таблице 7 для ядер вида (4.4) приводятся измерения рангов ТТ-аппроксимаций в зависимости от точности приближения  $\epsilon$  ядер по фробениусовой норме и числа задействованных уравнений  $N$ .

Все вместе указанные выше измерения подтверждают соответствующие алгоритмические сложности  $O(DRN \log N)$ ,  $O(DR^2N \log N)$ ,  $O(DR^3N)$  времен расчета для СР-реализации, ТТ-реализации и для построения ТТ-аппроксимации.

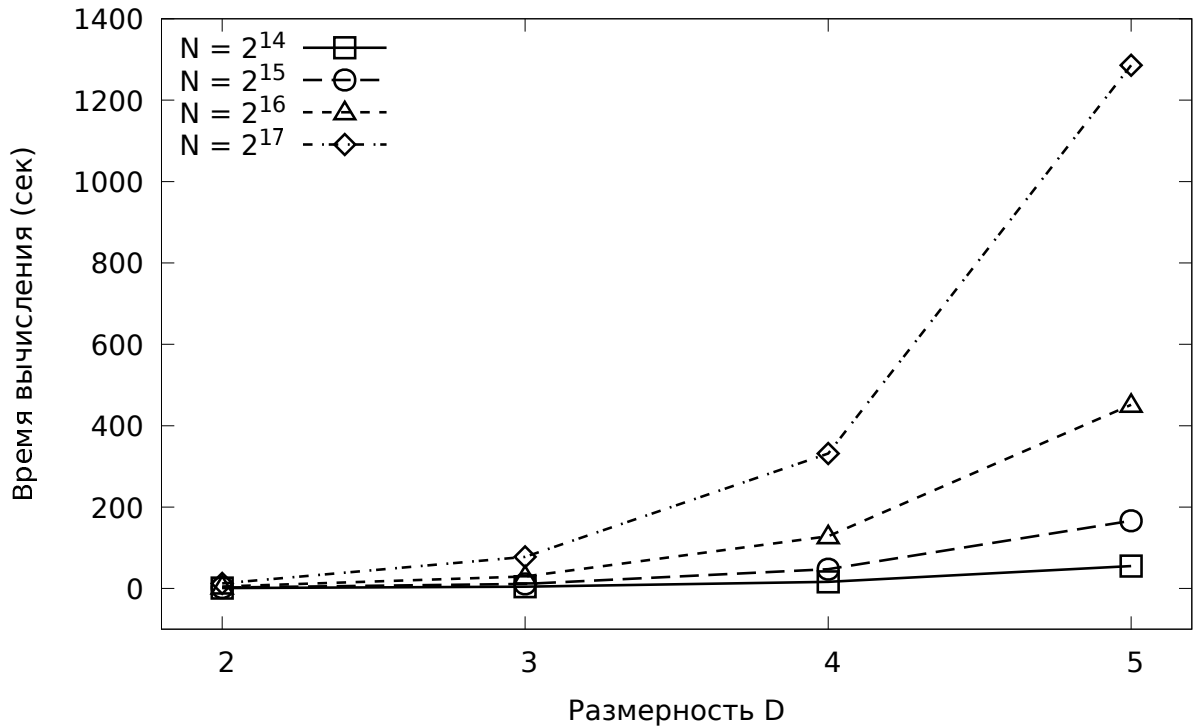


Рис. 4: Измерение времен расчета (без учета времени аппроксимации) для реализации схемы предиктор-корректор на основе приближенного ТТ-разложения в зависимости от допустимого количества  $D$  частиц, участвующих в одном взаимодействии. Кинетические коэффициенты  $C_{i_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$ ,  $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$ ,  $2 \leq \lambda \leq D$ ; начальные условия  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ , шаг  $\Delta t = 0.01$ , число итераций  $T = 100$ .

Таблица 7: Сравнение максимальных рангов ТТ-аппроксимаций для массивов кинетических коэффициентов  $C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$ ,  $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$ ,  $2 \leq \lambda \leq D$  в зависимости от точности  $\varepsilon$  приближения массива по норме и количества задействованных уравнений  $N$ .

$D$	Число уравнений $N$	$2^{14}$	$2^{15}$	$2^{16}$	$2^{17}$
2	$\varepsilon = 10^{-5}$	2	2	2	2
	$\varepsilon = 10^{-6}$	2	2	2	2
	$\varepsilon = 10^{-7}$	2	2	2	2
3	$\varepsilon = 10^{-5}$	3	3	3	3
	$\varepsilon = 10^{-6}$	3	3	3	3
	$\varepsilon = 10^{-7}$	3	3	3	3
4	$\varepsilon = 10^{-5}$	6	6	6	6
	$\varepsilon = 10^{-6}$	6	6	6	6
	$\varepsilon = 10^{-7}$	6	6	6	6
5	$\varepsilon = 10^{-5}$	8	9	9	9
	$\varepsilon = 10^{-6}$	9	9	10	10
	$\varepsilon = 10^{-7}$	10	10	10	10

Таблица 8: Измерения относительной погрешности  $|n - n_{\text{CP}}|/n$  аппроксимации полной концентрации агрегатов  $n$  в зависимости от времени для СР-реализации  $D$ -частичной схемы предиктор-корректор при известном аналитическом решении. Кинетические коэффициенты  $C_{\mathbf{i}_D}^{(D)} \equiv 1$ , начальные условия  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ , число уравнений  $N = 2^{17}$ , шаг  $\Delta t = 0.01$ . Полные концентрации  $n_{\text{CP}}$  и  $n_{\text{TT}}$  численных решений СР и ТТ-реализаций совпадают с машинной точностью.

Время $t$	$D = 2$	$D = 3$	$D = 4$	$D = 5$
1	$4.20 \cdot 10^{-6}$	$2.35 \cdot 10^{-6}$	$3.28 \cdot 10^{-7}$	$1.44 \cdot 10^{-8}$
10	$2.62 \cdot 10^{-6}$	$1.11 \cdot 10^{-6}$	$2.75 \cdot 10^{-7}$	$3.40 \cdot 10^{-8}$
100	$3.62 \cdot 10^{-7}$	$1.42 \cdot 10^{-7}$	$4.18 \cdot 10^{-8}$	$9.02 \cdot 10^{-9}$

Таблица 9: Измерения относительной разности  $|n_{\text{CP}} - n_{\text{TT}}|/n_{\text{CP}}$  аппроксимаций полной концентрации агрегатов в зависимости от времени для задачи Коши с кинетическими коэффициентами  $C_{\mathbf{i}_d}^{(d)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(d)}^{\mu_d}$ ,  $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$ ,  $2 \leq \lambda \leq d$  для всех  $2 \leq d \leq D$  и начальными условиями  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ . Число уравнений  $N = 2^{17}$ , шаг  $\Delta t = 0.01$ .

Время $t$	$D = 2$	$D = 3$	$D = 4$	$D = 5$
1	0.0	0.0	$1.0 \cdot 10^{-14}$	$1.17 \cdot 10^{-11}$
10	0.0	0.0	0.0	$1.54 \cdot 10^{-10}$
100	0.0	$1.90 \cdot 10^{-11}$	$2.37 \cdot 10^{-11}$	$4.58 \cdot 10^{-11}$

В таблице 8 приведены измерения относительной погрешности аппроксимации полной концентрации  $n(t)$  агрегатов в различные моменты времени  $t$  для  $D$ -частичной

задачи Коши с постоянными кинетическими коэффициентами  $C_{i_d}^{(D)} \equiv 1$  и монодисперсными начальными условиями  $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ . Расчеты показали согласованность кластерной плотности численного решения и аналитического решения (1.4). При этом полные концентрации численных решений для реализаций на основе обоих разложений совпадают с машинной точностью.

В случае ядер типа (4.4) неизвестно аналитическое решение задачи Коши. В таблице 9 для указанных ядер оценивается относительная разность полной концентрации  $|n_{CP} - n_{TT}|/n_{CP}$  агрегатов для двух реализаций схемы. В данной схеме учитываются столкновения любого числа частиц  $2 \leq d \leq D$ . Расчеты подтверждают совпадение кластерных плотностей численных решений.

В таблице 10 для массивов кинетических коэффициентов вида (4.5) представлены измерения рангов ТТ-аппроксимаций, соответствующие приведенным в §4.1 оценкам. Измерения для числа уравнений  $N = 2^{17}$  проиллюстрированы на рисунке 5. Из проведенных экспериментов следует, что алгоритмы ТТ-аппроксимации позволяют с приемлемой точностью получать приближенные разложения малых ТТ-рангов для ядер общего вида. Последнее означает универсальность предлагаемого эффективного метода решения задачи Коши для системы кинетических уравнений многочастичной агрегации.

Таблица 10: Сравнение максимальных рангов ТТ-аппроксимаций массивов кинетических коэффициентов  $C_{i_D}^{(D)} = |\mathbf{i}_D|^\alpha$  при  $\alpha = 0.5$  в зависимости от точности  $\varepsilon$  приближения по норме и количества задействованных уравнений  $N$ .

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

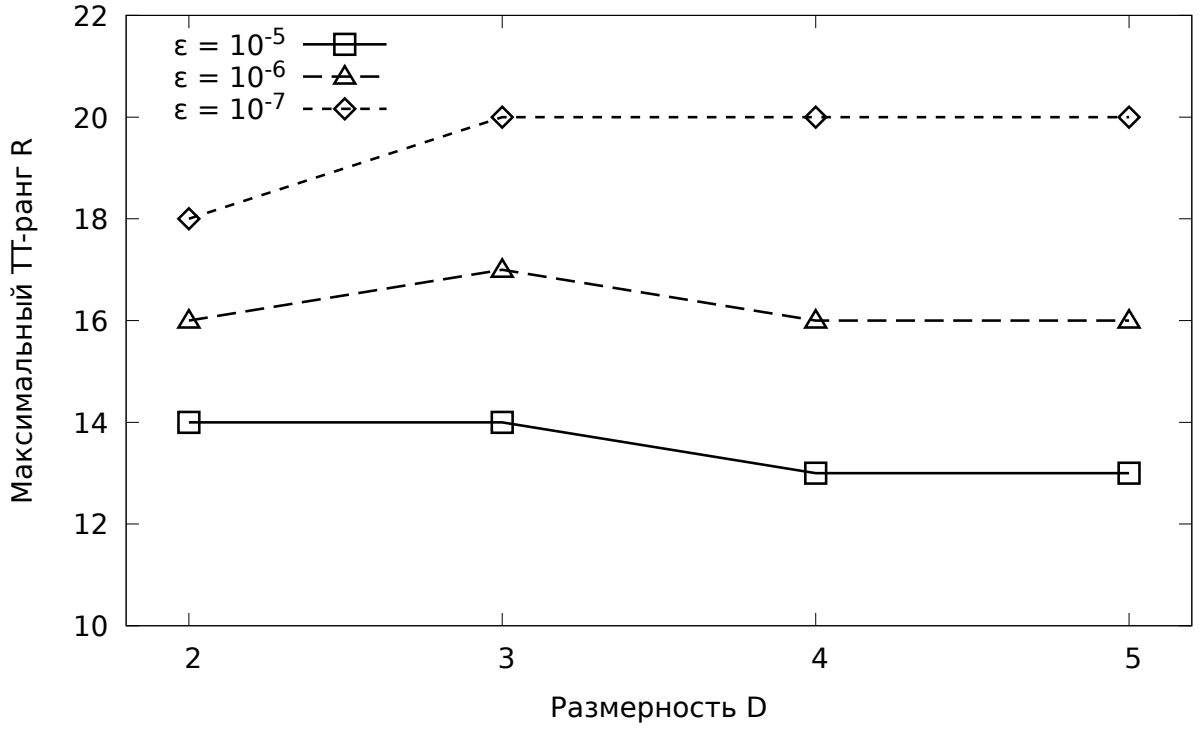


Рис. 5: Сравнение максимальных рангов ТТ-аппроксимаций для массивов кинетических коэффициентов  $C_{i_D}^{(D)} = |i_D|^\alpha$  при  $\alpha = 0.5$  в зависимости от точности  $\varepsilon$  приближения по норме. Количество уравнений  $N = 2^{17}$ .

Необходимо отметить, что в представленной реализации разностной схемы не использовалось допятие ТТ-разложения, которое позволяет снизить его ранги, а следовательно и алгоритмическую сложность шага схемы. Кроме того рассматриваемый разностный метод обладает ограниченным ресурсом параллелизма, что также не учитывалось в реализациях в данном разделе.

## 4.4 Численное моделирование задачи катализа металлических наночастиц

В настоящем разделе приводятся результаты численных экспериментов для эффективной реализации разностной схемы предиктор-корректор (1.5), задействующей тензорный поезд в качестве представления баллистического ядра и его трехчастичного обобщения следующего вида

$$C_{i_1, i_2}^{(2)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \cdot (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2})^2 \sqrt{\frac{i_1 + i_2}{i_1 i_2}}; \quad (4.6)$$

$$C_{i_1, i_2, i_3}^{(3)} = \frac{\alpha_{3/2}\sqrt{2}}{108\sqrt{3}} \cdot \sqrt{\frac{i_1 + i_2 + i_3}{i_1 i_2 i_3}} \cdot (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2} + \sqrt[3]{i_3})^2 \cdot \left[ (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_2})^3 \sqrt{\frac{i_1 i_2}{i_1 + i_2}} + (\sqrt[3]{i_1} + \sqrt[3]{i_3})^3 \sqrt{\frac{i_1 i_3}{i_1 + i_3}} + (\sqrt[3]{i_2} + \sqrt[3]{i_3})^3 \sqrt{\frac{i_2 i_3}{i_2 + i_3}} \right]. \quad (4.7)$$

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 (4.6) и (4.7) в таблице 11 приводятся значения максимальных рангов ГТ-аппроксимаций. Указанные ранги соответствуют теоретическим оценкам из главы 3.

Таблица 11: Сравнение максимальных рангов ГТ-аппроксимаций для массивов  $\mathfrak{C}^{(D)}$  кинетических коэффициентов (4.6) и (4.7) в зависимости от точности  $\varepsilon$  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 решение задачи Коши, что отображено на рисунке 6 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.

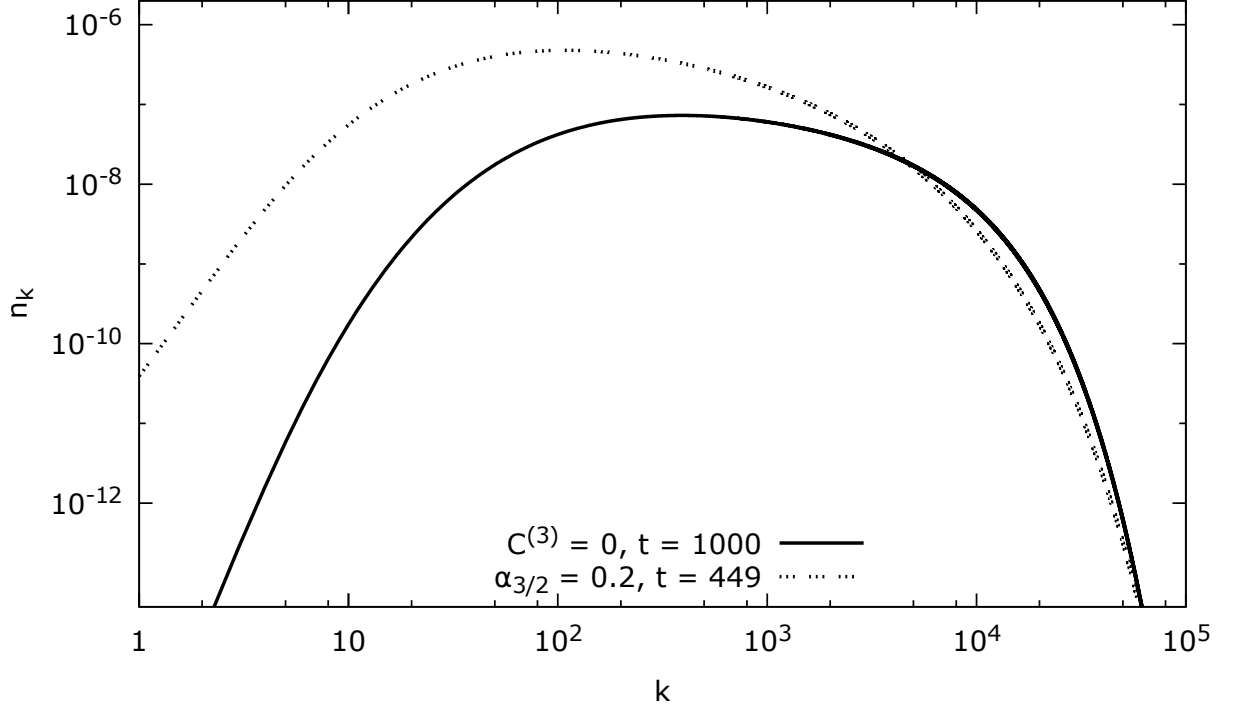


Рис. 6: Сравнение профилей решения задачи Коши в разные моменты времени  $t$ , соответствующей ядрам (4.6) и (4.7), с учетом и без учета трехчастичных взаимодействий.

Далее в разделе 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

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

При выбранном начальном условии и выполнении закона сохранения массы (закон соблюдается при достаточном количестве задействованных уравнений) выполняется тождество  $R_1(t) \equiv 1/n(t)$ .



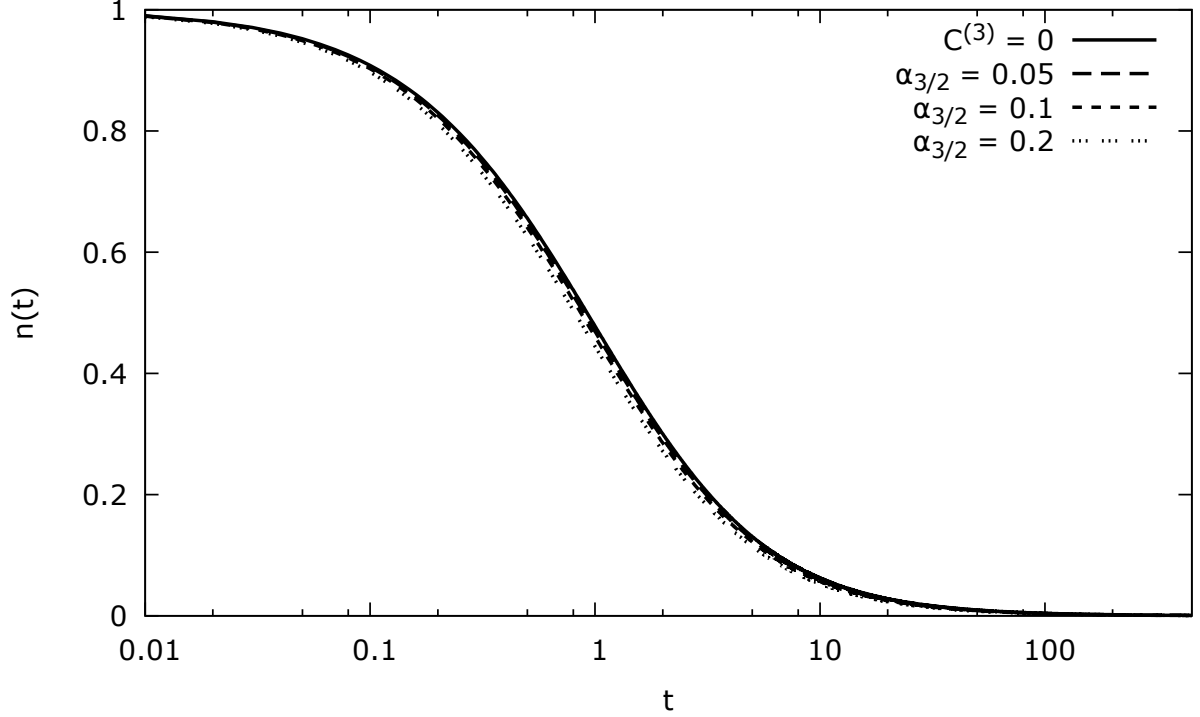


Рис. 7: Сравнение полной концентрации агрегатов для задачи Коши, соответствующей ядрам (4.6) и (4.7), при значениях  $\alpha_{3/2} = 0.05, 0.1, 0.2$ , и для двухчастичной задачи (когда  $\mathbf{c}^{(3)} = \mathbf{0}$ ). Для выполнения закона сохранения массы количество уравнений  $N$  адаптивно увеличивается от  $2^{13}$  до  $2^{17}$  с ростом времени  $t$ . Логарифмическая шкала по времени.

Из графика 7 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 8, 9. Отсюда ясно, что присутствие многочастичных столкновений характерным образом сказывается на росте моментов решения

$$\omega_{\xi}[\mathbf{n}] \equiv \sum_{k \geq 1} k^{\xi} \cdot n_k(t)$$

старших порядков  $\xi$ . 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.

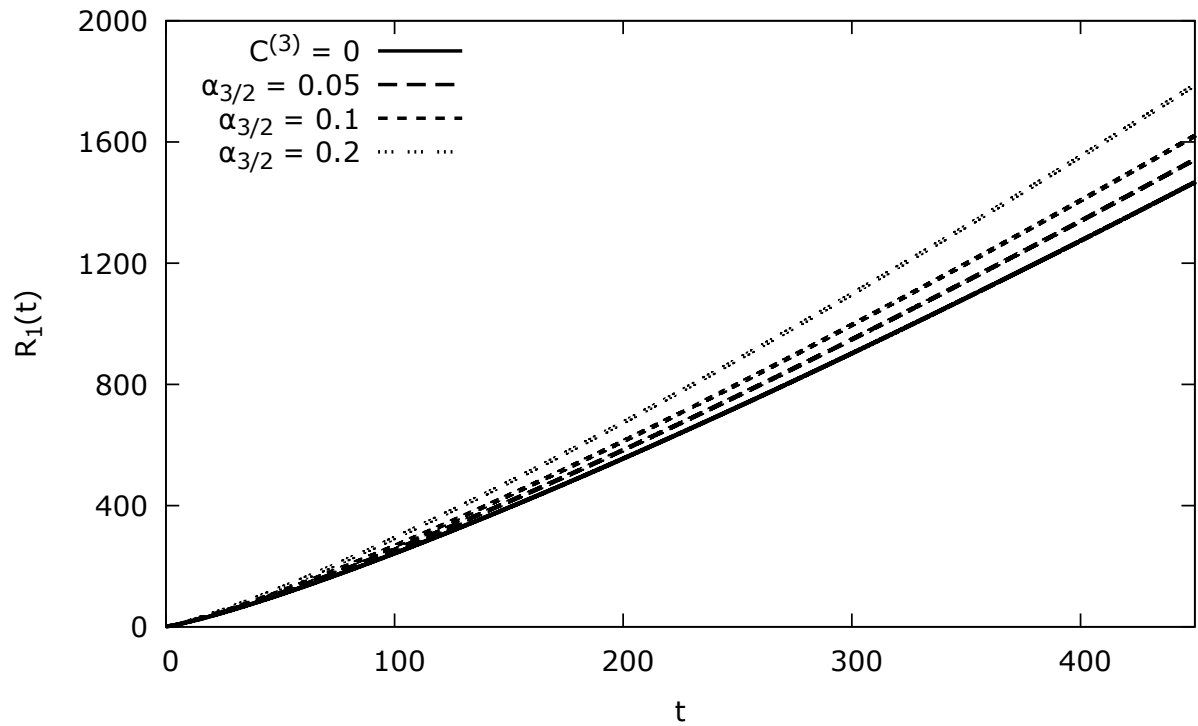


Рис. 8: Сравнение среднего геометрического размера агрегатов для задачи Коши, соответствующей ядрам (4.6) и (4.7), при значениях  $\alpha_{3/2} = 0.05, 0.1, 0.2$ , и для двухчастичной задачи (когда  $\mathfrak{C}^{(3)} = \mathbf{0}$ ). Для выполнения закона сохранения массы количество уравнений  $N$  адаптивно увеличивается от  $2^{13}$  до  $2^{17}$  с ростом времени  $t$ .

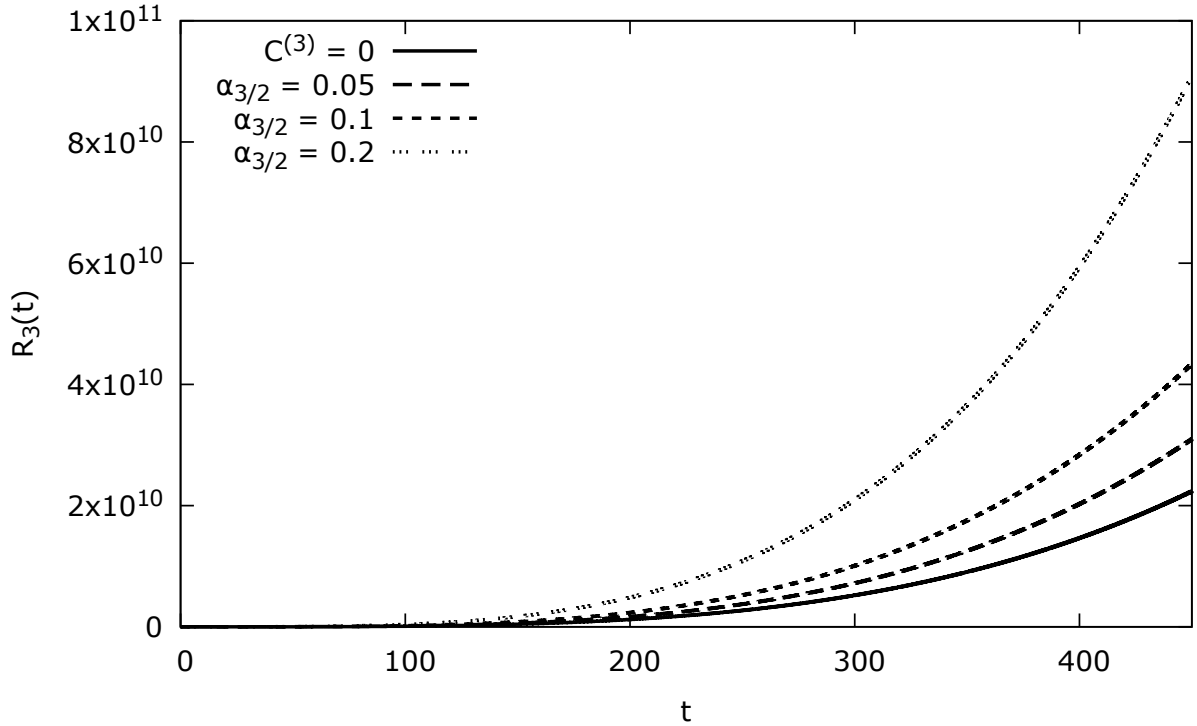


Рис. 9: Сравнение среднего объемного размера агрегатов для задачи Коши, соответствующей ядрам (4.6) и (4.7), при значениях  $\alpha_{3/2} = 0.05, 0.1, 0.2$ , и для двухчастичной задачи (когда  $\mathbf{c}^{(3)} = \mathbf{0}$ ). Для выполнения закона сохранения массы количество уравнений  $N$  адаптивно увеличивается от  $2^{13}$  до  $2^{17}$  с ростом времени  $t$ .

## 4.5 Масштабируемость параллельной реализации метода численного решения задачи Коши многочастичной агрегации

При использовании приведенных в предыдущем разделе баллистического ядра и его трехчастичного обобщения нами было произведено тестирование параллельных алгоритмов для организации вычислений операторов многочастичной агрегации  $\mathcal{S}^{(d)}$ . Наиболее дорогостоящей операцией в указанных алгоритмах является операция вычисления дискретной свертки массивов, то есть дискретного преобразования Фурье. 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 12). Также в настоящем разделе было проведено сравнение ускорений для двухчастичной и трехчастичной агрегации. В случае тройных столкновений количество вычислений естественным образом значительно возрастает в силу использования тензорного произведения 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. 10. 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 12: Ускорения времен расчета для параллельной реализации эффективных вычислений оператора трехчастичной агрегации. Число уравнений  $N = 2^{19}$ . Количество итераций 10.

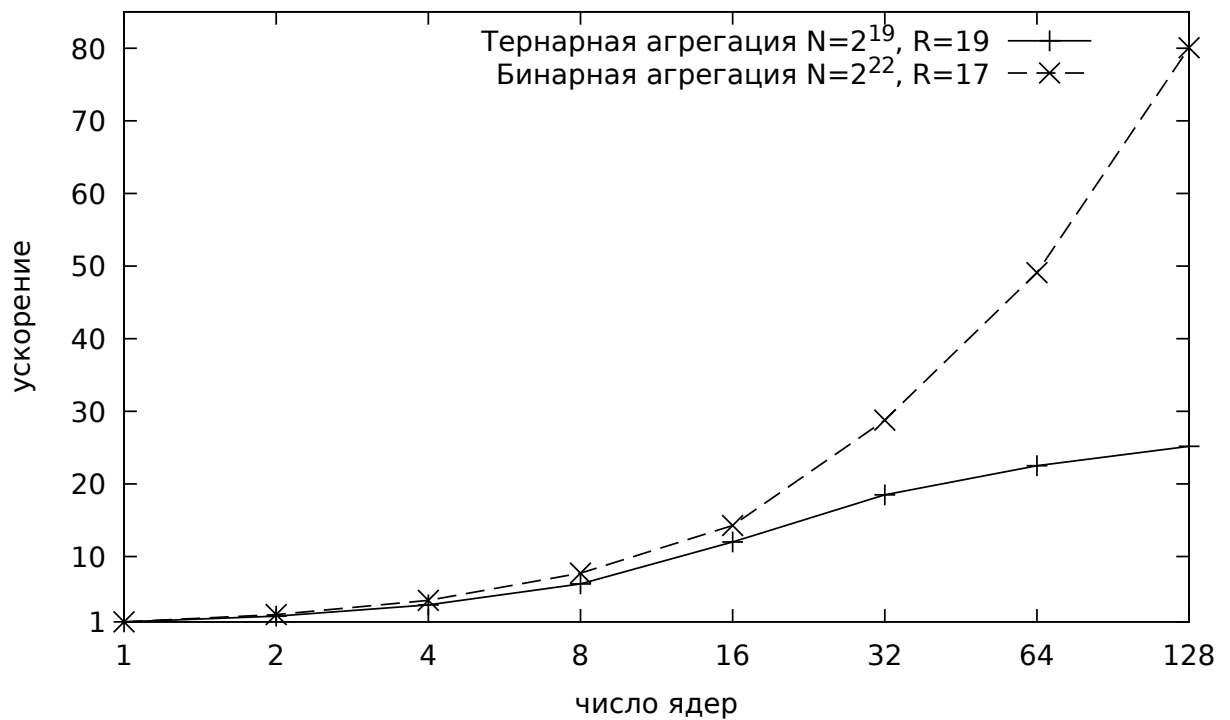


Рис. 10: Ускорения времен расчета для параллельной реализации эффективных вычислений операторов двухчастичной и трехчастичной агрегации. Соответственно 16 и 10 шагов интегрирования по времени для количества уравнений  $N = 2^{22}$  и  $N = 2^{19}$ . Параметром  $R$  обозначен максимальный ранг используемых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

# Заключение

В настоящей диссертационной работе рассмотрена задача агрегационной кинетики, сформулированная в классе обобщенных уравнений Смолуховского, допускающих множественные взаимодействия агрегатов. Работа посвящена исследованию и построению эффективных алгоритмов организации вычислений для численного решения систем многочастичных кинетических уравнений. Основным результатом 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 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.

# Список используемых обозначений

В данном разделе приводится система обозначений, единая для всех глав настоящей работы.

Под понятием вектора всюду в работе подразумевается вектор-столбец с вещественными компонентами, если не оговорено противного. При этом пространства  $\mathbb{R}^{N \times 1}$  и  $\mathbb{R}^N$  отождествляются, когда не важна конкретная природа вектора. Таким образом без потери смысла векторы и мультииндексы обозначаются схожим образом, природу обозначаемого объекта можно понять из контекста. Кроме того, считается допустимым для вектора иметь бесконечное количество компонент.

$:=$	равно по определению
$a, A, \alpha$	скаляр, индекс
$\mathbf{a} = [a_1, a_2, \dots]^T$	вектор с компонентами $a_k$
$\mathbf{a}_N := [a_1, a_2, \dots, a_N]^T$	вектор, составленный из данных $N$ компонент $a_k$
$\mathbf{i}_d := (i_1, i_2, \dots, i_d)$	мультииндекс с заданными компонентами $i_\lambda$
$ \mathbf{i}_d  := i_1 + i_2 + \dots + i_d$	сумма компонент мультииндекса
$\sigma(\mathbf{i}_d) := (i_{\sigma(1)}, i_{\sigma(2)}, \dots, i_{\sigma(d)})$	перестановка компонент мультииндекса
$(i_1, i_2, \dots, i_d) > 0$	покомпонентное выполнение неравенств $i_\lambda > 0$
$a_{\mathbf{i}_d} := a_{i_1, i_2, \dots, i_d}$	нумерация скаляра мультииндексом $\mathbf{i}_d$
$a_{\mathbf{i}_{d-1}, k} := a_{i_1, i_2, \dots, i_{d-1}, k}$	нумерация мультииндексом $(i_1, i_2, \dots, i_{d-1}, k)$
$\mathfrak{A} = [A_{\mathbf{i}_d}]$	многомерная матрица (тензор) с элементами $A_{\mathbf{i}_d}$
$\mathbf{A} = [a_{i_1, i_2}]$	обычная (двумерная) матрица с элементами $a_{i_1, i_2}$
$\mathcal{A}$	множество
$\mathcal{A}[\cdot]$	оператор на множестве векторов
$\omega_\xi[\mathbf{a}] := \sum_{k \geq 1} k^\xi \cdot a_k$	$\xi$ -момент вектора $\mathbf{a}$
$\{f + g\}(t), \{f \cdot g\}(t)$	сумма и произведение функций $f(t)$ и $g(t)$
$\left\{ \sum_{k \in \mathcal{A}} + \sum_{k \in \mathcal{B}} \beta_k \right\} a_k$	сумма всех $a_{i_1}$ для $i_1 \in \mathcal{A}$ и всех $\beta_{i_2} \cdot a_{i_2}$ для $i_2 \in \mathcal{B}$
$\delta_{i,j}$	символ Кронекера: $\delta_{i,j} = 0$ для $i \neq j$ , иначе $\delta_{i,j} = 1$

# Список литературы

- [1] von Smoluchowski M. Drei Vortrage uber Diffusion, Brownsche Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen // *Zeitschrift fur Physik*, 17:557–585, 1916.
- [2] Müller H. Zur allgemeinen Theorie ser raschen Koagulation // *Fortschrittsberichte über Kolloide und Polymere*, 27(6):223–250, 1928.
- [3] Алюян А. Е. Динамика и кинетика газовых примесей и аэрозолей в атмосфере. *Курс лекций, ИВМ РАН*, 2002.
- [4] Brilliantov N. V., Krapivsky P. L., Bodrova A. S., Spahn F., Hayakawa H., Stadnichuk V. and Schmidt J. Particle size distribution in Saturn’s rings: Aggregation-fragmentation model // *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2014.
- [5] Brilliantov N. V., Bodrova A. S. and Krapivsky P. L. A model of ballistic aggregation and fragmentation // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2009(06):P06011, 2009.
- [6] Pöschel T., Brilliantov N. V. and Frömmel C. Kinetics of prion growth // *Biophysical journal*, 85(6):3460–3474, 2003.
- [7] Cohen F. E., Pan K.-M., Huang Z., Baldwin M., Fletterick R. J. and Prusiner S. B. Structural clues to prion replication // *Science*, 264(5158):530–531, 1994.
- [8] Eigen M. Prionics or the kinetic basis of prion diseases // *Biophysical chemistry*, 63(1):A1–A18, 1996.
- [9] Kalay Z. and Ben-Naim E. Fragmentation of random trees // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 48(4):045001, 2015.
- [10] Ben-Naim E. and Krapivsky P. L. Popularity-driven networking // *EPL (Europhysics Letters)*, 97(4):48003, 2012.
- [11] Krapivsky P. L., Redner S. and Ben-Naim E. *A kinetic view of statistical physics*. Cambridge University Press, 2010.

- [12] Ball R. C., Connaughton C., Jones P. P., Rajesh R. and Zaboronski O. Collective oscillations in irreversible coagulation driven by monomer inputs and large-cluster outputs // *Physical review letters*, 109(16):168304, 2012.
- [13] Hayakawa H. Irreversible kinetic coagulations in the presence of a source. // *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 20(12):L801, 1987.
- [14] Ben-Naim E. and Krapivsky P. L. Polymerization with freezing // *Journal of Physics: Condensed Matter*, 17(49):S4249, 2005.
- [15] Волощук В. М. и Седунов Ю. С. *Процессы коагуляции в дисперсных системах*. Гидрометеиздат, 1975.
- [16] Галкин В. А. *Уравнение Смолуховского*. Физматлит, Москва, 2001.
- [17] Silk J. and White S. D. The development of structure in the expanding universe // *The Astrophysical Journal*, 223:L59–L62, 1978.
- [18] Melzak Z. A. A scalar transport equation // *Trans. Amer. Math. Soc.*, 85:547–560, 1957.
- [19] Leyvraz F. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation // *Physics Reports*, 383(2):95–212, 2003.
- [20] Матвеев С. А. Быстрые методы численного решения уравнений типа Смолуховского. *Кандидатская диссертация*, 2018.
- [21] 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.
- [22] 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.
- [23] Stefonishin D. A. On the Generic Rank of Matrices Composed of Kronecker Products // *Doklady Mathematics*, 97(2):125–128, 2018.
- [24] 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.
- [25] Family F. and Landau D. P. *Kinetics of aggregation and gelation*. Elsevier, 2012.



- [26] Агошков В. И. *Избранные труды*. ИВМ РАН, 2016.
- [27] Agoshkov V. I. and Dubovski P. B. 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.
- [28] Bodrova A. S., Stadnichuk V., Krapivsky P. L., Schmidt J. and Brilliantov N. V. Kinetic regimes in aggregating systems with spontaneous and collisional fragmentation // *arXiv preprint arXiv:1807.11326*, 2018.
- [29] Brilliantov N. V., Otieno W., Matveev S. A., Smirnov A. P., Tyrtysnikov E. E. and Krapivsky P. L. Steady oscillations in aggregation-fragmentation processes // *Physical Review E*, 98(1):012109, 2018.
- [30] Hassan M. K. and Hassan M. Z. Emergence of fractal behavior in condensation-driven aggregation // *Physical Review E*, 79(2):021406, 2009.
- [31] Hassan M. K. and Hassan M. Z. Condensation-driven aggregation in one dimension // *Physical Review E*, 77(6):061404, 2008.
- [32] Cueille S. and Sire C. Smoluchowski's equation for cluster exogenous growth // *EPL (Europhysics Letters)*, 40(3):239, 1997.
- [33] Family F. and Meakin P. Kinetics of droplet growth processes: Simulations, theory, and experiments // *Physical review A*, 40(7):3836, 1989.
- [34] Krapivsky P. L. and Redner S. Transitional aggregation kinetics in dry and damp environments // *Physical Review E*, 54(4):3553, 1996.
- [35] Brener A. M. Model of many-particle aggregation in dense particle systems // *Chem. Eng. Trans.*, 38:145–150, 2014.
- [36] Krapivsky P. L. Aggregation processes with  $n$ -particle elementary reactions // *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24(19):4697, 1991.
- [37] Jiang Y. and Gang H. Generalized Smoluchovski equation with gelation // *Physical Review B*, 39(7):4659, 1989.
- [38] Matveev S. A., Smirnov A. P. and Tyrtysnikov E. E. A fast numerical method for the cauchy problem for the Smoluchowski equation // *Journal of Computational Physics*, 282:23–32, 2015.
- [39] Hackbusch W. Approximation of coalescence integrals in population balance models with local mass conservation // *Numerische Mathematik*, 106(4):627–657, 2007.

- [40] Matveev S. A., Zheltkov D. A., Tyrtysnikov E. E. and Smirnov A. P. Tensor train versus Monte Carlo for the multicomponent Smoluchowski coagulation equation // *Journal of Computational Physics*, 316:164–179, 2016.
- [41] Smirnov A. P., Matveev S. A., Zheltkov D. A. and Tyrtysnikov E. E. Fast and accurate finite-difference method solving multicomponent Smoluchowski coagulation equation with source and sink terms // *Procedia Computer Science*, 80:2141–2146, 2016.
- [42] Matveev S. A., Zagidullin R. R., Smirnov A. P. and Tyrtysnikov E. E. Parallel numerical algorithm for solving advection equation for coagulating particles // *Supercomputing Frontiers and Innovations*, 5(2):43–54, 2018.
- [43] Matveev S. A., Krapivsky P. L., Smirnov A. P., Tyrtysnikov E. E. and Brilliantov N. V. Oscillations in aggregation-shattering processes // *Physical review letters*, 119(26):260601, 2017.
- [44] Matveev S. A., Stadnichuk V. I., Tyrtysnikov E. E., Smirnov A. P., Ampilogova N. V. and Brilliantov N. V. Anderson acceleration method of finding steady-state particle size distribution for a wide class of aggregation–fragmentation models // *Computer Physics Communications*, 224:154–163, 2018.
- [45] Debry E., Sportisse B. and Jourdain B. A stochastic approach for the numerical simulation of the general dynamics equation for aerosols // *Journal of Computational Physics*, 184(2):649–669, 2003.
- [46] Krus F. E., Maisels A., and Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation // *AIChE Journal*, 46(9):1735–1742, 2000.
- [47] Palaniswamy G. and Loyalka S. K. Direct simulation Monte Carlo aerosol dynamics: coagulation and collisional sampling // *Nuclear technology*, 156(1):29–38, 2006.
- [48] Tyrtysnikov E. E. *A brief introduction to numerical analysis*. Springer, 1997.
- [49] Колмогоров А. и Фомин С. *Элементы теории функций и функционального анализа*. Наука, 1976.
- [50] Bellman R. et al. The stability of solutions of linear differential equations // *Duke Mathematical Journal*, 10(4):643–647, 1943.
- [51] Матвеев С. А., ТЫРТЫШНИКОВ Е. Е., Смирнов А. П. и Бриллиантов Н. В. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // *Вычислительные методы и программирование*, 15(1):1–8, 2014.

- [52] Kolda T. G. and Bader B. W. Tensor decompositions and applications // *SIAM review*, 51(3):455–500, 2009.
- [53] Cichocki A., Mandic D., de Lathauwer L., Zhou G., Zhao Q., Caiafa C. and Phan H. A. Tensor decompositions for signal processing applications: From two-way to multiway component analysis // *IEEE Signal Processing Magazine*, 32(2):145–163, 2015.
- [54] Hitchcock F. Multiple invariants and generalized rank of a  $p$ -way matrix or tensor // *Studies in Applied Mathematics*, 7(1-4):39–79, 1928.
- [55] Harshman R. Foundations of the PARAFAC procedure: Models and conditions for an “explanatory” multi-modal factor analysis // *UCLA Working Papers in Phonetics*, 1970.
- [56] Beylkin G. and Mohlenkamp M. J. Algorithms for numerical analysis in high dimensions // *SIAM Journal on Scientific Computing*, 26(6):2133–2159, 2005.
- [57] Тыртышников Е. Е. *Основы алгебры*. Физматлит, Москва, 2017.
- [58] Friedland S. On the generic and typical ranks of 3-tensors // *Linear Algebra and its Applications*, 436(3):478–497, 2012.
- [59] Bürgisser P., Clausen M. and Shokrollahi M. *Algebraic complexity theory*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [60] Sakata T., Sumi T., Miyazaki M., et al. *Algebraic and computational aspects of real tensor ranks*. Springer, 2016.
- [61] Abo H., Ottaviani G. and Peterson C. Induction for secant varieties of Segre varieties // *Transactions of the American Mathematical Society*, 361(2):767–792, 2009.
- [62] Laface A. and Postinghel E. Secant varieties of Segre-Veronese embeddings of  $(\mathbb{P}^1)^r$  // *Mathematische Annalen*, 356(4):1455–1470, 2013.
- [63] Lickteig T. Typical tensorial rank // *Linear algebra and its applications*, 69:95–120, 1985.
- [64] Strassen V. Rank and optimal computation of generic tensors // *Linear algebra and its applications*, 52:645–685, 1983.
- [65] L. Tucker. Some mathematical notes on three-mode factor analysis // *Psychometrika*, 31(3):279–311, 1966.
- [66] de Lathauwer L., de Moor B. and Vandewalle J. A multilinear singular value decomposition // *SIAM journal on Matrix Analysis and Applications*, 21(4):1253–1278, 2000.

- [67] Oseledets I. V. and Tyrtyshnikov E. E. Breaking the curse of dimensionality, or how to use SVD in many dimensions // *SIAM Journal on Scientific Computing*, 31(5):3744–3759, 2009.
- [68] Oseledets I. V. Tensor-train decomposition // *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33(5):2295–2317, 2011.
- [69] Oseledets I. V. and Tyrtyshnikov E. E. TT-cross approximation for multidimensional arrays // *Linear Algebra and its Applications*, 432(1), 2008.
- [70] Чугунов В. Н. *Нормальные и перестановочные теплицевы и ганкелевы матрицы*. Наука, Москва, 2017.
- [71] Beylkin G. and Monzón L. On approximation of functions by exponential sums // *Applied and Computational Harmonic Analysis*, 19(1):17–48, 2005.