На правах рукописи

Матвеев Сергей Александрович

–

Быстрые методы численного решения уравнений типа Смолуховского

05.13.18 – Математическое моделирование,

численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

– Москва – 2018

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

Научный руководитель: *академик РАН,*
доктор физико-математических наук, профессор,
Тыртышников Евгений Евгеньевич

Официальные оппоненты: *д. ф-м. н.,*
доцент, ФГБОУ ВО “Курский государственный университет”, заведующий отделом теоретической физики научно-исследовательского центра физики конденсированного состояния, профессор факультета физики, математики, информатики
Постников Евгений Борисович

к. ф-м. н.,
старший научный сотрудник ФГБУН Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук,
Сорокин Андрей Александрович

Ведущая организация: *Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения РАН*

Защита состоится «14» марта 2018 г. в __:__ на заседании диссертационного совета Д 002.045.01 в Институте вычислительной математики Российский академии наук, расположенном по адресу: 119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8.

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

Автореферат разослан __________ 2018 г.

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

Ученый секретарь
диссертационного совета,

д.ф.-м.н., профессор *Бочаров Геннадий Алексеевич*

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Математические модели, записанные при помощи уравнений типа Смолуховского описывают процесс слияния огромного числа хаотически движущихся частиц сложной пространственно-однородной системы, возникающий вследствие их неупругих соударений. Формально, эти модели описывают эволюцию концентраций частиц сколь угодно больших размеров на единицу объёма среды.

Модели данного типа используются для описания самых разнообразных явлений и технологических процессов: математические модели процессов коагуляции-дробления используются при изучении динамики аэрозолей в атмосфере, для описания процессов агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна, роста полимеров, кинетики белков-прионов, описания динамики образования крупных сообществ в социальных сетях и др.

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

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

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

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

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

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

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

- Предложены и обоснованы быстрые алгоритмы численного решения уравнений типа Смолуховского. В частности, предложены быстрые вычислительные методы решения уравнений математических моделей процессов необратимой коагуляции, агрегации и фрагментации частиц в кольцах Сатурна, необратимой коагуляции с источником и стоком частиц, процессов агрегации и фрагментации частиц в профиле почв.

- Новые алгоритмы реализованы в виде программного комплекса, проведён ряд численных экспериментов, иллюстрирующих эффективность и точность предложенных алгоритмов. Для рассматриваемых математических моделей качественно, расширен класс решаемых задач, с применением предложенных алгоритмов получен ряд новых результатов математического моделирования.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались

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

и на следующих конференциях:

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

7. “Ломоносовские чтения 2016” (МГУ им. М. В. Ломоносова, Москва, 2016)
8. “20th Conference of the International Linear Algebra Society ILAS 2016” (Лёвен, Бельгия, 2016)
9. 59 научная Конференция МФТИ (Москва – Долгопрудный – Жуковский, 2016)
10. “The Sixth China-Russia Conference on Numerical Algebra with Applications” (Москва, 2017)
11. “30th Marian Smoluchowski Symposium on Statistical Physics” (Краков, Польша 2017)

   .

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

Публикации По теме работы были опубликованы 12 работ, среди которых 5 статей [9, 2, 8, 4, 6] (все входят в перечень ВАК), а также 7 печатных работ [10, 11, 12, 5, 1, 3, 7] в сборниках тезисов и трудов конференций.

В работе [9] автор сформулировал оригинальные идеи ускорения численной схемы предиктор-корректор, разработал их программную реализацию и провёл обширные вычислительные эксперименты по исследованию возможностей использования предложенных идей на практике. Авторство математических моделей из данной работы принадлежит Н. В. Бриллиантову, постановка задачи численного анализа рассматриваемых уравнений принадлежит Тыртышникову Е.Е. и Смирнову А. П. Работа [8] выполнена автором полностью самостоятельно. В работе [2] автору принадлежат доказательство теоремы о разделении переменных баллистического ядра коагуляции, формулировка эффективной численной схемы решения уравнения коагуляции Смолуховского в непрерывном виде, а также выполнение численных экспериментов, связанных с исследованием производительности разностной методологии. Тыртышникову Е.Е. принадлежит постановка задачи о снижении алгоритмической сложности рассматриваемой разностной схемы, Смирнову А. П. принадлежат программная реализация и вычислительные эксперименты, связанные с исследованием производительности метода Mass Flow Monte Carlo. В работе [4] автор предложил оригинальные идеи выполнения многомерных интегральных преобразований и доказал теоремы о разделении переменных нескольких классов ядер коагуляции и одного класса аналитических решений уравнения Смолуховского. Результаты, связанные с тестированием производительности метода Mass Flow Monte Carlo в случае многокомпонентного уравнения коагуляции в [4] принадлежат Смирнову А. П. Желтков Д. А. принимал участие в непосредственной программной реализации предложенных в работе алгоритмов, а идейная постановка задачи выполнена всеми авторами работы совместно. В [6] автором проделана большая работа по тестированию производительности программной реализации нового метода решения уравнения многокомпонентной коагуляции для модели с источником и стоком частиц. Постановка решенной в работе задачи выполнена совместно со Смирновым А. П., а Желтков Д. А. и Тыртышников Е.Е. принимали участие в валидации полученных результатов.

Личный вклад автора Диссертационное исследование является самостоятельным и законченным трудом автора.

Структура работы. Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка литературы и списка публикаций автора. Общий объем диссертации 118 страниц, включая 16 рисунков, 17 таблиц и список литературы из 88 наименований.

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

Содержание работы.

Во **введении** обоснована актуальность темы диссертационной работы, сформулированы ее цели и задачи, описана структура диссертации.

В **первой главе** приводится обзор структуры и общие свойства математических моделей агрегации и дробления вещества, записанных в классе уравнений типа Смолуховского. В частности, рассматриваются уравнения следующих моделей:

- Непрерывное уравнение коагуляции Смолуховского

$$\begin{aligned}\frac{\partial n(v,t)}{dt} = \frac{1}{2}\int\limits_0^v C(u, v-u) n(u,t) n(v-u,t) du - \\ - n(v,t)\int\limits_0^\infty C(v,u) n(u,t) du.\end{aligned} \quad (1)$$

- Модель процесса необратимой коагуляции с источником мономеров

$$\begin{cases} \frac{dn_1}{dt} = J - n_1 \sum\limits_{i=1}^{N} C_{1i} n_i \\ \\ \frac{dn_k}{dt} = \frac{1}{2}\sum\limits_{i=1}^{k-1} C_{i,k-i} n_i n_{k-i} - n_k \sum\limits_{i=1}^{N} C_{ki} n_i, \quad k = \overline{2, N}. \end{cases} \quad (2)$$

- Модель агрегации и фрагментации вещества в кольцах Сатурна

$$\begin{cases} \frac{dn_k(t)}{dt} = \frac{1}{2}\sum\limits_{i+j=k} C_{i,j} n_i n_j - (1+\lambda) n_k \sum\limits_{j\geq 1} C_{j,k} n_j \ , \qquad k = \overline{2,\infty}\,. \\ \\ \frac{dn_1}{dt} = -n_1 \sum\limits_{j\geq 1} C_{1,j} n_j + \frac{\lambda}{2}\sum\limits_{i,j\geq 2} C_{i,j}(i+j) n_i n_j + \lambda n_1 \sum\limits_{j\geq 2} j C_{1,j} n_j \qquad . \end{cases} \quad (3)$$

- Уравнение многокомпонентной коагуляции

$$\begin{aligned}\frac{\partial n(\overline{v},t)}{\partial t} = \frac{1}{2}\int\limits_0^{v_1} ... \int\limits_0^{v_d} C(\overline{v}-\overline{u};\overline{u}) n(\overline{v}-\overline{u},t) n(\overline{u},t) du_1 ... du_d - \\ - n(\overline{v},t)\int\limits_0^\infty ... \int\limits_0^\infty C(\overline{u};\overline{v}) n(\overline{u},t) du_1 ... du_d.\end{aligned} \quad (4)$$

В главе перечислены известные теоретические факты о разрешимости уравнений рассматриваемых моделей, известные классы аналитических решений.

Во **второй главе** приводятся необходимые сведения из области теории малоранговых матричных и тензорных разложений, а именно понятие ранга матрицы, методы построения малоранговых матричных разложений, дано определение канонического тензорного ранга и канонического тензорного разложения, даны определения разложения в формате тензорного поезда и ТТ-рангов. Тензор $f(i_1, \ldots, i_d)$ представим в виде тензорного поезда (ТТ-формате), если справедливо следующее тождество

$$f(i_1, \ldots, i_d) = \sum_{\alpha_0=1}^{r_0} \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \ldots \sum_{\alpha_d=1}^{r_d} f_1(\alpha_0, i_1, \alpha_1) \ldots f_d(\alpha_{d-1}, i_d, \alpha_d). \quad (5)$$

Индексы α_i принято называть ранговыми, числа $r_1, r_2, \ldots, r_d$ – тензорными рангами, среди которых $r_0 = r_d = 1$. Тензоры $f_k(\alpha_{k-1}, i_k, \alpha_k)$ – ядра (вагоны) TT-разложения. Если $i_1 = 1, 2 \ldots N$, $i_2 = 1, 2 \ldots N$, $i_d = 1, 2 \ldots N$, для хранения тензора $f(i_1, \ldots, i_d)$, представленного в виде TT-разложения требуется $O(dNR^2)$ ячеек памяти вместо исходных $O(N^d)$, где

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

Вычисление элемента тензора, представленного в виде TT-разложения может быть выполнено за $O(dr^2)$ операций умножения с помощью d умножений матриц размеров $r \times r$ на векторы размера r. Отметим, что из малости ранга канонического разложения тензора $f(i_1, \ldots, i_d)$ автоматически следует существование малорангового представления этого же тензора в TT-формате (обратное же, вообще говоря, неверно).

Далее во второй главе сформулированы численные методы решения однокомпонентных моделей коагуляции и дробления вещества, приведён обзор нескольких методов Монте Карло. В **секциях 2.2** и **2.3** предложены новые эффективные методы ускорения шагов разностной схемы предиктор-корректор на основе применения малоранговых матричных аппроксимаций функций ядер коагуляции и быстрых алгоритмов линейной алгебры. Основная идея ускорения состоит в предварительном построении малорангового скелетного разложения матрицы значений ядра коагуляции

$$C_{i,j} \approx \sum_{\alpha=1}^{R} U_\alpha(i) V_\alpha(j) \tag{6}$$

с дальнейшим сведением операций суммирования к умножению малоранговой матрицы на вектор или к операции нижнетреугольной свёртки массивов. В результате сложность выполнения одного шага интегрирования по времени снижается с $O(N^2)$ до $O(NR \log N)$ арифметических операций. Дополнительно во второй главе предложена эффективная схема распараллеливания новых быстрых методов, и предложен простейший быстрый итерационный метод решения однокомпонентных моделей в стационарной форме.

В **секции 2.3** второй главы предлагаются два новых численных метода решения многокомпонетного уравнения коагуляции Смолуховского, основанные одновременном использовании малоранговых аппроксимаций ядра коагуляции и решения в формате тензорного поезда для ускорения шагов явной разностной схемы предиктор-корректор. Первый метод основан на вложенном применении алгоритма построения малоранговых приближений массивов в TT-формате. Вместо исходных $O(N^{2d})$ операций общая сложность выполнения одного шага схемы интегрирования по времени составит $O(d^3 N^2 R^8)$ арифметических операций, где d – число компонент в уравнении Смолуховского, N – количество узлов в сетке по каждому из направлений, а R – максимальный из ТТ-рангов используемых массивов. Несмотря на теоретическую привлекательность и простоту предложенной методологии, множитель d^2R^8 в асимптотике, квадратичный рост сложности с числом узлов N, а также невозможность адаптации этих идей к однокомпонентным задачам, делают её малопривлекательной и неконкурентноспособной в сравнении с методами Монте Карло.

Второй предложенный метод основан на использовании быстрых операций с массивами в ТТ-формате при выполнении шагов схемы интегрирования по времени. Для реализации данного метода в секции предложены новые алгоритмы вычисления операции нижнетреугольной билинейной интегральной свертки функций при помощи квадратуры трапеций со вторым порядком точности:

$$\begin{aligned} q(\overline{v}) = \sum_{\alpha_1,\ldots,\alpha_d} \sum_{\beta_0,\ldots,\beta_d} \int\limits_0^{v_1} f_1(\alpha_0, v_1-u_1,\alpha_1)\; g_1(\beta_1,u_1,\beta_2)du_1 \times \\ \times \ldots \times \\ \times \int\limits_0^{v_d} f_d(\alpha_{d-1}, v_d-u_d,\alpha_d) \ldots g_d(\beta_{d-1},u_d,\beta_d)du_d \end{aligned} \tag{7}$$

При использовании разложений подынтегральных функции в формате тензорного поезда приводится к конечной формуле

$$\begin{gathered} q(\overline{v}) = \sum_{\alpha_0,\ldots,\alpha_d} \sum_{\beta_0,\ldots,\beta_d} \int\limits_0^{v_1} f_1(\alpha_0, v_1-u_1,\alpha_1)\; g_1(\beta_1,u_1,\beta_2)du_1 \times \\ \times \ldots \times \\ \times \int\limits_0^{v_d} f_d(\alpha_{d-1}, v_d-u_d,\alpha_d) \ldots g_d(\beta_{d-1},u_d,\beta_d)du_d \end{gathered} \tag{8}$$

из $O(dR^2)$ одномерных нижнетреугольных свёрток, каждая из которых может быть вычислена за $O(N\log N)$ арифметических операций. Конечная сложность выполнения данного интегрального преобразования составляет $O(dR^2N\log N \;+\; d^2NR^5)$. Также в секции предложен быстрый метод вычисления следующего интегрального оператора в параллелепипеде в ТТ-формате со вторым порядком точности:

$$q(\overline{v}) = \int\limits_0^{V_{\max}} \ldots \int\limits_0^{V_{\max}} C(\overline{v};\overline{u}) f(\overline{u}) du_1 \ldots du_d \tag{9}$$

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

$$C(\overline{v};\overline{u}) := \sum_{\alpha_0,\alpha_1,\ldots\alpha_d,\alpha_{d+1},\ldots,\alpha_{2d}} C_1(\alpha_0,v_1,\alpha_1)\ldots C_{2d}(\alpha_{2d-1},v_d,\alpha_{2d}) :=$$
$$= \sum_{\alpha_0,\alpha_1,\ldots\alpha_d,\alpha_{d+1},\ldots,\alpha_{2d}} C_1^v(\alpha_0,v_1,\alpha_1)\ldots C_d^v(\alpha_{d-1},v_d,\alpha_d)\times$$
$$\times C_1^u(\alpha_d,u_1,\alpha_{d+1})\ldots C_d^u(\alpha_{2d-1},u_1,\alpha_{2d}).$$

Тогда мы можем легко переписать (9) в следующей форме

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

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

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

и I_{α_d} – набор из R_d скалярных значений

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

Следовательно, если функции $C(\overline{v};\overline{u})$ и $f(\overline{u})$ уже заданы в виде TT-формата и необходимо вычислить интегральный оператор (9), то достаточно вычислить набор скалярных значений I_{α_d} и вычислить линейную комбинацию тензорных поездов $\widetilde{C^v_{\alpha_d}}(\overline{v})$ с этими скалярными коэффициентами. Вычисление интегралов вида I_{α_d} с помощью стандартных квадратурных формул (например, с помощью формулы трапеций) и дальнейшее вычислений линейных комбинаций функций, представленных в виде TT-формата — стандартные операции TT-арифметики и могут быть выполнены за $O(dNR^4)$ операций.

В результате, значения $q(\overline{v})$ из (9) можно получить за $O(dNR^4)$ операций, если мы опять воспользуемся TT-крестовым методом. Так, сложность вычислительного алгоритма может быть оценена, как $O(d^2NR^4)$, т.е. формально возрастает в dR раз. На практике, мы наблюдаем обратное, так как TT-ранги используемых массивов, вычисленных при помощи TT-крестового метода оказываются меньше, чем в формальной теоретической оценке.

Таким образом, интегральный оператор вида (9) может быть вычислен с точностью $O(h^2)$ за $O(d^2NR^5)$ арифметических операций.

Итоговая сложность выполнения одного шага схемы интегрирования по времени с использованием предложенных быстрых методов вычисления интегральных преобразований в ТТ-формате составит $O(dR^3N\log N \ + d^2NR^6)$ операций.

В **третьей главе** даны необходимые теоретические оценки рангов ТТ-разложений некоторых функций ядер коагуляции, а также оценки рангов одного класса известных аналитических решений задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского:

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

Теорема 2. *Многокомпонентное ядро обобщённого умножения*

$$C(\overline{u};\overline{v}) = (\sum_{i=1}^{d} u_i)^\nu(\sum_{i=1}^{d} v_i)^\mu + (\sum_{i=1}^{d} u_i)^\mu(\sum_{i=1}^{d} v_i)^\nu, \nu+\mu \le 1, |\nu-\mu| \le 2,$$

а также многокомпонентное баллистическое ядро

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

можно приблизить с точностью ε *в области* $(\overline{u},\overline{v}) \in [0,L]^{2d}$ *с помощью разложения с разделёнными переменными с числом слагаемых* $R = O(\log \frac{1}{\varepsilon} \log L)$

Теорема 3. *Аналитические решения задачи Коши с константным ядром вида*

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

можно приблизить с помощью разложений с разделенными переменными

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

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

Полученные теоретические оценки доказывают эффективность сформулированной методологии, а также её применимость к широкому классу математических моделей, записанных в классе уравнений Смолуховского.

В **четвёртой главе** приводится описание программного комплекса с реализацией всех описанных в данной работе алгоритмов и множественные результаты численных экспериментов по тестированию эффективности сформулированной методологии. Проведено сравнение новых методов с исходной разностной методологией и с методами Монте Карло. Предложенная схема распараллеливания быстрого метода решения однокомпонентных моделей протестирована на кластере ИВМ РАН и суперкомпьютере "Ломоносов". Результаты тестирования масштабируемости параллельной реализации предложенного алгоритма при использовании суперкомпьютера "Ломоносов" приведены в таблице 1. Пример результатов математического моделирования процессов агрегации и фрагментации в профиле почвы приведен на Рис. 1. При использовании быстрых вычислительных методов, предложенных в данной работе продемонстрировано качественное влияние содержания углерода на распределения почвенных агрегатов по размерам. По мере увеличения насыщенности почвенного профиля минералами мы получаем более "узкие" распределения частиц по размерам. В главе также представлены результаты исследования математической модели

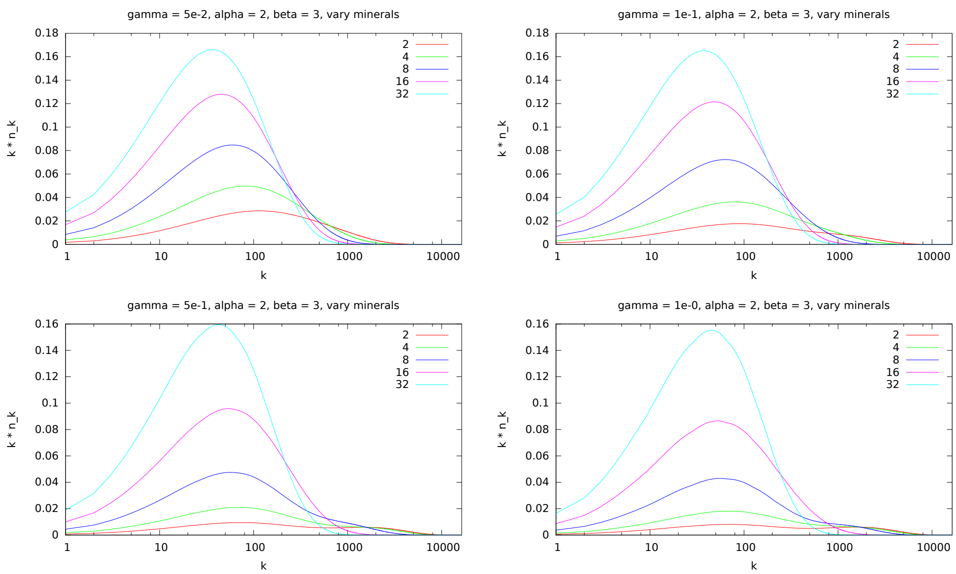

Рис. 1. Влияние содержания углерода на распределения почвенных агрегатов по размерам. По мере увеличения насыщенности почвенного профиля минералами мы получаем более "узкие" распределения частиц по размерам.

процессов агрегации и фрагментации в кольцах Сатурна. Для класса ядер обобщённого умножения получены стационарные распределения частиц по размерам, согласующиеся с известными теориями, а также осциллирующие решения (Рис. 2) модели вне области аналитически исследованных параметров.

На практике продемонстрированы малые ранги, как функций ядер коагуляции, так и

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

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

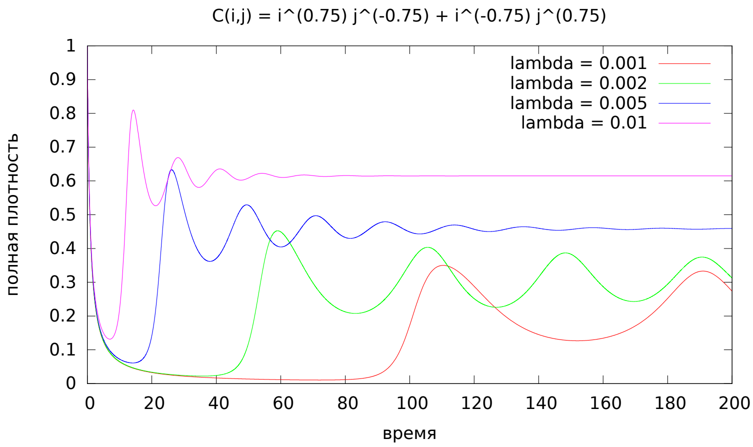

Рис. 2. Эволюция полной плотности агрегатов стационарных решений задачи Коши и решений с осциллирующей полной плотностью агрегатов. Начальное условие $n_{k_0} = \frac{1}{10}, k = \overline{1,10}, n_{k_0} = 0, k > 10$; ядро $C(i,j) = i^{0.75} j^{-0.75} + i^{-0.75} j^{0.75}$. Для проведения расчётов использовался кластер ИВМ РАН.

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

В таблицах 2, 3 мы демонстрируем производительность быстрого метода, основанного на использовании ТТ-разложений в сравнении с исходной схемой предиктор-корректор в

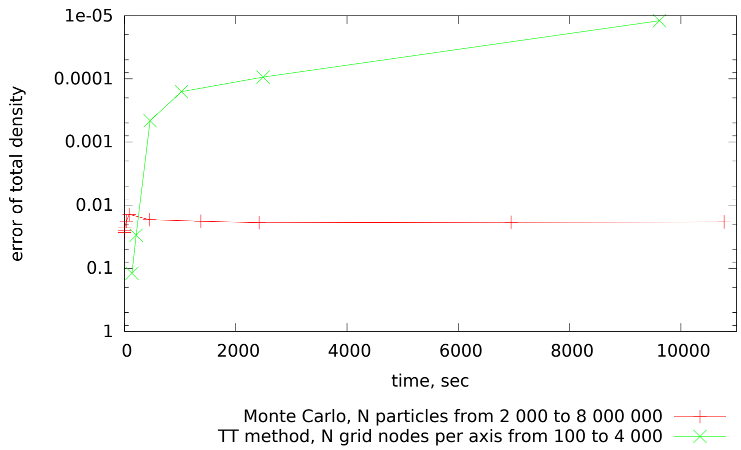

Рис. 3. Относительная погрешность в терминах полной плотности и вычислительное время ТТ-метода в сравнении с методоам Монте Карло в случае задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и известным аналитическим решением.

Таблица 2. Эффективность и точность нового метода в сравнении с прямой реализацией исходной разностной схемы предиктор-корректор в случае задачи Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром и известным аналитическим решением на отрезке времени $t \in [0; 10]$.

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

случае численного решения задач Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского. Мы наблюдаем качественное ускорение исходной разностной методологии без потери точности. Вычисления занимавшие несколько суток при использовании исходной схемы, теперь можно выполнить за 1-2 часа. Такое ускорение позволяет утверждать, что классиче-

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

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

ские конечно-разностные схемы могут быть успешно применены для решения задач Коши для многокомпонентного уравнения Смолуховского. Итоговое сравнение новой методологии и метода Монте Карло с точки зрения роста вычислительного времени в зависимости от точности расчёта приведено на рис. 3. Из рисунка следует, что предложенная методология оказывается более эффективной при необходимости получения численных решений многокомпонентного уравнения Смолуховского с высокой точностью.

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

Основные результаты работы

Основной результат работы: предложены и обоснованы новые эффективные алгоритмы численного решения уравнений математических моделей процессов коагуляции и дробления вещества и реализован комплекс программ для численного решения уравнений математических моделей, записанных в классе уравнений Смолуховского. Кроме того получены следующие частные результаты

- Предложены быстрые алгоритмы численного решения дискретных и непрерывных моделей агрегации и дробления однокомпонентного вещества.
- Предложена и протестирована эффективная схема распараллеливания предложенных методов решения однокомпонентных моделей.

- Предложены быстрые алгоритмы численного решения непрерывного многокомпонентного уравнения Смолуховского с источниками и стоками частиц.
- Предложен быстрый итерационный метод решения рассмотренных однокомпонентных моделей в стационарном виде.
- Получены оценки рангов функций ядер коагуляции: константного, аддитивного, мультипликативного, баллистического, обобщённого ядра умножения.
- Получены оценки рангов одного класса аналитических решений задач Коши для двухкомпонентного уравнения Смолуховского с константным ядром.
- Эффективность предложенных методов сопоставлена с производительностью классической разностной схемы предиктор-корректор и с производительностью стохастической методологии.

Полученные теоретические результаты и комплекс программ значительно расширяют класс решаемых математических моделей агрегации и дробления вещества, а также позволяют существенно повысить робастность и точность расчётов.

Публикации автора по теме диссертационной работы

1. Matveev SA. Parallel implementation of the fast method solving the kinetic equations of aggregation and fragmentation. *Theses of international conference on Matrix Methods in Mathematics and Applications-2015*, pages 64–65, 2015.
2. Matveev SA, Smirnov AP , and Tyrtyshnikov EE. A fast numerical method for the cauchy problem for the smoluchowski equation. *Journal of Computational Physics*, 282:23–32, 2015.
3. Matveev SA, Tyrtyshnikov EE, and Smirnov AP. Fast method for systems of Smoluchowski-type kinetic equations. *Abstracts of the 8th International Congress on Industrial and Applied Mathematics*, pages 126–127, 2015.
4. Matveev SA, Zheltkov DA, Tyrtyshnikov EE, and Smirnov AP. Tensor train versus monte carlo for the multicomponent smoluchowski coagulation equation. *Journal of Computational Physics*, 316:164–179, 2016.
5. Vasilyeva NA, Vladimirov AA, Smirnov AP, Matveev SA, Tyrtyshnikov EE, Yudina A, Milanovskiy E, and Shein EV. Self-organizing biochemical cycle in dynamic feedback with soil structure. *Geophysical Research Abstracts*, 18:EGU2016–10089–3, 2016.

6. Smirnov AP, Matveev SA, Zheltkov DA, Tyrtyshnikov EE. Fast and accurate finite-difference method solving multicomponent smoluchowski coagulation equation with source and sink terms. *Procedia Computer Science*, 80:2141–2146, 2016.
7. Vasilyeva NA, Vladimirov AA, Matveev SA, Smirnov AP, Tyrtyshnikov EE, and Shein EV. Microbially-driven soil aggregate structure formation. In *EGU General Assembly Conference Abstracts*, volume 19, page 11701, 2017.
8. Матвеев СА. Параллельная реализация быстрого метода решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского. *вычислительные методы и программирование*, 16:361, 2015.
9. Матвеев СА, Тыртышников ЕЕ, Смирнов АП, Бриллиантов НВ. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского. *Вычислительные Методы и Программирование*, 15:1, 2014.
10. Матвеев СА, Смирнов АП, Тыртышников ЕЕ. Решение уравнения Смолуховского с помощью ТТ-разложений с квадратичной сложностью. *тезисы конференции Тихоновские чтения 2013*, стр 64, 2013.
11. Матвеев СА, Смирнов АП, Тыртышников ЕЕ. Решение уравнения Смолуховского с помощью ТТ-разложений с квадратичной сложностью по числу узлов в расчётной сетке. *тезисы конференции МФТИ-56*, 2013.
12. Матвеев СА, Тыртышников ЕЕ. Быстрый метод решения кинетических уравнений агрегации и фрагментации. *тезисы конференции Ломоносовские чтения 2014*, стр 50–51, 2014.