

ТЕНЗОРНЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ АГРЕГАЦИИ, ДОПУСКАЮЩИХ МНОГОЧАСТИЧНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ

Д. А. Стефонишин¹, С. А. Матвеев², А. П. Смирнов³, Е. Е. Тыртышников⁴

Предложены эффективные методы численного решения задачи Коши для системы кинетических уравнений агрегации типа уравнений Смолуховского, допускающих множественные столкновения частиц. Разработанные методы основываются на представлении массивов кинетических коэффициентов в виде тензорных разложений. Выполнено сравнение канонического тензорного разложения, разложения Таккера и тензорного произведения (ТТ). Для каждого из рассматриваемых тензорных представлений получены оценки сложности выполнения шага разностной схемы Рунге–Кутты второго порядка. Для канонического и ТТ-разложений проведены численные эксперименты, демонстрирующие эффективность предложенных методов для систем, допускающих одновременные столкновения вплоть до пяти частиц.

Ключевые слова: многочастичные уравнения Смолуховского, кинетика процессов агрегации, схема предиктор–корректор, малоранговые тензорные аппроксимации, дискретная свертка.

1. Введение. Кинетические уравнения типа уравнений Смолуховского являются традиционным способом описания неупругих взаимодействий элементов сложной физической системы. Неупругие соударения частиц лежат в основе различных природных и технологических явлений: от роста полимеров до образования звезд [1, 2]. В таких физических процессах типичная система состоит из большого числа хаотически сталкивающихся элементов, равномерно распределенных в пространстве. В настоящей статье рассматривается дискретный вариант уравнений. Такая модель описывает ситуацию, когда все частицы (агрегаты) состоят из определенного числа частиц минимального возможного в данной системе размера (мономеров). Мы ограничиваемся случаем отсутствия процесса фрагментации частиц, а также источников и стоков.

Частицы рассматриваемой физической системы характеризуются своим размером (объемом или массой), т.е. количеством k мономеров, из которых они состоят. Каждое уравнение в системе кинетических уравнений описывает эволюцию во времени концентрации $n_k(t)$ частиц соответствующего размера k вследствие процесса агрегации. При отсутствии процесса фрагментации 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 $\mathbf{n}(t) = [n_1(t), n_2(t), \dots]^T$.

В системах кинетических уравнений почти всегда 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 одновременные взаимодействия многих частиц. В частности, вклад таких взаимодействий может быть замечен, когда продукты множественных столкновений являются существенно более стабильными, чем продукты бинарных. Процессы агрегации, допускающие множественные столкновения, могут быть описаны так называемыми “многочастичными” уравнениями типа Смолуховского, имеющими вид

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \sum_{d=2}^D [\mathcal{P}^{(d)}(\mathbf{n}) + \mathcal{Q}^{(d)}(\mathbf{n})], \quad (1)$$

¹ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, 119992, Москва; аспирант, e-mail: stefonishin@gmail.com

² Сколковский институт науки и технологий, ул. Нобеля, д. 3, 121205, Москва; мл. науч. сотр., e-mail: s.matveev@skoltech.ru

³ Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, факультет вычислительной математики и кибернетики, Ленинские горы, 119992, Москва; доцент, e-mail: sap@cs.msu.ru

⁴ Институт вычислительной математики им. Г. И. Марчука РАН, ул. Губкина, 8, 119333, Москва; директор, e-mail: eugene.tyrtysnikov@gmail.com

где операторы $\mathcal{P}^{(d)} = [p_1^{(d)}, p_2^{(d)}, \dots]^T$ и $\mathcal{Q}^{(d)} = [q_1^{(d)}, q_2^{(d)}, \dots]^T$ задаются своими компонентами

$$p_k^{(d)}(\mathbf{n}) = \frac{1}{d!} \sum_{I_d=k} C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)} n_{i_1} n_{i_2} \dots n_{i_d}, \quad I_d = i_1 + i_2 + \dots + i_d, \quad k = \overline{1, \infty}, \quad d = \overline{2, D};$$

$$q_k^{(d)}(\mathbf{n}) = -\frac{n_k}{(d-1)!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{d-1}=1}^{\infty} C_{i_1, i_2, \dots, i_{d-1}, k}^{(d)} n_{i_1} n_{i_2} \dots n_{i_{d-1}}, \quad k = \overline{1, \infty}, \quad d = \overline{2, D}.$$

Здесь предполагается, что в физической системе допустимы все типы столкновений по количеству участвующих в них частиц для $d = \overline{2, D}$. Фиксированный параметр D определяет максимальное число агрегатов, участвующих 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 [3].

В уравнениях (1) величины $p_k^{(d)}$ и $q_k^{(d)}$ целиком и полностью отвечают за d -частичные взаимодействия, приводящие к изменению концентрации агрегатов размера k . Компонента $p_k^{(d)}$ описывает скорость образования частиц размера $k = I_d = i_1 + i_2 + \dots + i_d$ посредством столкновений частиц всевозможных размеров i_1, i_2, \dots, i_d . Компонента $q_k^{(d)}$ определяет скорость, с которой агрегаты размера k исчезают за счет соударений с частицами любых других возможных в системе размеров i_1, i_2, \dots, i_{d-1} . Отметим, что из физических соображений следуют неотрицательность кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)}$ и их симметричность относительно размеров взаимодействующих частиц. Симметрией коэффициентов объясняется наличие множителей (зависящих от d) перед суммами в определениях компонент, позволяющих избежать кратного суммирования.

Для указанной бесконечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений (1) можно рассматривать задачу Коши при задании начальных условий

$$\mathbf{n}(0) = [n_{1,0}, n_{2,0}, \dots]^T. \tag{2}$$

В качестве характеристик процесса агрегации, описываемого задачей Коши (1), (2), в момент времени t вводятся полная концентрация агрегатов n и общая масса вещества m , а именно

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

Для системы уравнений (1) при $D = 2$ известны линейные ограничения на рост кинетических коэффициентов вида $\sup_{i_1, i_2} C_{i_1, i_2}^{(2)} (1 + i_1 + i_2)^{-1} < \infty$, гарантирующие выполнение закона сохранения массы $m(t) = m(0)$ при начальных условиях из достаточно широкого класса [1]. Можно показать, что в более общем случае системы при $D > 2$ масса не обязана сохраняться, когда для коэффициентов хотя бы при одном $d = \overline{2, D}$ наблюдается сверхлинейный рост.

Если в среде возможны только D -частичные столкновения, то равны нулю кинетические коэффициенты, отвечающие за иные типы столкновений. В таком случае уравнения (1) принимают вид

$$\frac{d\mathbf{n}}{dt} = \mathcal{P}^{(D)}(\mathbf{n}) + \mathcal{Q}^{(D)}(\mathbf{n}). \tag{3}$$

Аналитическое решение задачи Коши (2), (3) известно только для кинетических коэффициентов специального простого вида при определенных начальных условиях [4–6].

Свойства систем кинетических уравнений (1) при $D = 2$ хорошо изучены [1, 2, 7]. Эффективный разностный метод приближенного численного решения двухчастичной системы обсуждался в работе [8]. Кроме того, распространенными численными методами решения задачи Коши для двухчастичных кинетических уравнений являются методы Монте-Карло [9, 10]. Однако большая сложность многочастичной системы 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), (2). Пусть параметр N определяет количество уравнений, задействованных при аппроксимации исходной бесконечной системы (1) обыкновенных дифференциальных уравнений конечной системой. В обозначениях $\mathbf{n}_N^s = [n_1^s, n_2^s, \dots, n_N^s]^T$ при $s = 0, 1/2, 1, \dots$, где $n_k^s \approx n_k(s \cdot \Delta t)$ для

$k = 1, 2, \dots, N$, указанная разностная схема для конечной системы может быть записана следующим образом:

$$\begin{cases} \mathbf{n}_N^0 = [n_{1,0}, n_{2,0}, \dots, n_{N,0}]^T, \\ \frac{\mathbf{n}_N^{s+1/2} - \mathbf{n}_N^s}{\Delta t/2} = \sum_{d=2}^D [\mathcal{P}_N^{(d)}(\mathbf{n}_N^s) + \mathcal{Q}_N^{(d)}(\mathbf{n}_N^s)], \\ \frac{\mathbf{n}_N^{s+1} - \mathbf{n}_N^s}{\Delta t} = \sum_{d=2}^D [\mathcal{P}_N^{(d)}(\mathbf{n}_N^{s+1/2}) + \mathcal{Q}_N^{(d)}(\mathbf{n}_N^{s+1/2})]. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь операторы $\mathcal{P}_N^{(d)} = [p_1^{(d)}, p_2^{(d)}, \dots, p_N^{(d)}]^T$ и $\mathcal{Q}_N^{(d)} = [q_1^{(d)}, q_2^{(d)}, \dots, q_N^{(d)}]^T$ задаются компонентами

$$p_k^{(d)}(\mathbf{n}_N) \equiv p_k^{(d)}(\mathbf{n}) = \frac{1}{d!} \sum_{I_d=k} C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)} n_{i_1} n_{i_2} \dots n_{i_d}, \quad k = \overline{1, N}, \quad d = \overline{2, D};$$

$$q_k^{(d)}(\mathbf{n}_N) = -\frac{n_k}{(d-1)!} \sum_{i_1, i_2, \dots, i_{d-1}=1}^N C_{i_1, i_2, \dots, i_{d-1}, k}^{(d)} n_{i_1} n_{i_2} \dots n_{i_{d-1}}, \quad k = \overline{1, N}, \quad d = \overline{2, D}.$$

Разностная схема (4) имеет второй порядок точности по времени. Основными препятствиями для ее прямого применения являются сложность вычисления операторов $\mathcal{P}_N^{(d)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(d)}$ на каждом шаге схемы и затраты на хранение в памяти кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)}$. 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 этой проблемы может служить использование малоранговых тензорных аппроксимаций массивов коэффициентов $C^{(d)} = [C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)}]$ (называемых также ядрами) и быстрых алгоритмов линейной алгебры. При этом для представления ядра в памяти и приближенного вычисления операторов $\mathcal{P}_N^{(d)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(d)}$ могут быть использованы известные тензорные разложения, такие как каноническое (CP — Canonical Polyadic), разложение Таккера или ТТ-разложение (Tensor Train decomposition). Таким образом, алгоритмическая сложность построения указанных аппроксимаций, сложность вычислений на каждом шаге схемы и объемы используемой для расчетов памяти напрямую зависят от малости рангов используемых тензорных аппроксимаций.

В настоящей статье обобщаются результаты работ [8, 11, 12], посвященных численному методу решения систем двухчастичных и трехчастичных кинетических уравнений типа Смолуховского. Предлагаются эффективные методы приближенного численного решения систем уравнений более общего вида, допускающих множественные столкновения агрегатов. При этом снижается асимптотика алгоритмической сложности разностной схемы Рунге–Кутты второго порядка и количества используемых ячеек оперативной памяти за счет эффективных алгоритмов вычисления операторов $\mathcal{P}_N^{(d)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(d)}$ с использованием тензорных разложений. Разработанные методы позволяют качественно расширить круг задач, доступных для детального изучения методами математического моделирования.

2. Тензорные разложения. В этом разделе сравниваются основные известные тензорные разложения с целью выявления наиболее подходящего из них для вычисления операторов $\mathcal{P}_N^{(D)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(D)}$. Такие представления многомерных массивов (называемых также тензорами) являются обобщениями скелетного разложения матриц и основаны на идее разделения переменных. Тензорные аппроксимации ядра $C^{(D)}$ будут рассматриваться с некоторой фиксированной допустимой погрешностью ε по фробениусовой норме $\|\cdot\|_F$. Указанная норма для заданного тензора $T = [T_{i_1, i_2, \dots, i_D}]$ определяется выражением $\|T\|_F^2 = \sum_{i_1, i_2, \dots, i_D} T_{i_1, i_2, \dots, i_D}^2$.

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

$$C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \approx \sum_{\rho} u_{i_1, \rho}^{(1)} \cdot u_{i_2, \rho}^{(2)} \cdot \dots \cdot u_{i_D, \rho}^{(D)}. \quad (5)$$

Число слагаемых R в правой части называется рангом разложения (5). Минимальное возможное R в точном разложении указанного вида называется каноническим тензорным рангом (или просто рангом) тен-

зора $C^{(D)}$. Матрицы $U^{(\lambda)} = [u_{i_\lambda, \rho}^{(\lambda)}] \in \mathbb{R}^{N \times R}$ для $\lambda = \overline{1, D}$ называются факторами канонического разложения (5). Указанное представление тензоров изначально было предложено в работе [13]. Основным преимуществом такого представления при малом R является малое число определяющих его параметров $O(DRN)$, а следовательно, и малое число ячеек памяти, необходимых для хранения тензора. При этом поиск приближенных разложений малого ранга указанного вида в общем случае при $D > 2$ представляет собой весьма трудную задачу. Приближенное каноническое разложение можно пытаться вычислить с помощью известных итерационных алгоритмов, например методом переменных направлений (ALS — Alternating Least Squares) [14]. Сложность итерации такого алгоритма составляет $O(R^3 + R^2N)$, если известен ранг R текущей аппроксимации рассматриваемого тензора [15]. Важно отметить, что алгоритмы указанного вида могут работать медленно и не гарантируют сходимости к оптимальному разложению.

Другим широко известным применением идеи разделения переменных в многомерном случае является разложение Таккера, впервые рассмотренное в работе [16]. Оно определяется соотношениями

$$C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \approx \sum_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D} G_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D} \cdot v_{i_1, \rho_1}^{(1)} \cdot v_{i_2, \rho_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot v_{i_D, \rho_D}^{(D)}. \quad (6)$$

Если индексы ρ_λ изменяются в пределах $\overline{1, R_\lambda}$ для $k = \overline{1, D}$, то числа R_λ называются рангами разложения Таккера (6). Минимальные возможные R_λ среди всех точных разложений указанного вида называются рангами Таккера для тензора $C^{(D)}$. Тензор $G = [G_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D}] \in \mathbb{R}^{R_1 \times R_2 \times \dots \times R_D}$ называется ядром, а матрицы $V^{(\lambda)} = [v_{i_\lambda, \rho_\lambda}^{(\lambda)}] \in \mathbb{R}^{N \times R_\lambda}$ называются факторами разложения Таккера (6).

Пусть $R = \max \{R_\lambda : \lambda = \overline{1, D}\}$. Для указанного представления тензора $C^{(D)}$ существует устойчивый алгоритм аппроксимации сложности $O(R^D N)$, основанный на поиске сингулярных разложений некоторых специальных матриц [16, 17]. Однако практическая применимость разложения Таккера существенно зависит от малости величины R , поскольку необходимо использовать $O(R^D + DRN)$ параметров, определяющих разложение.

При большой размерности D имеет смысл рассматривать ТТ-разложение (тензорный поезд), не имеющее недостатков описанных выше разложений [18, 19]. В таком представлении элементы ядра $C^{(D)}$ можно приближенно записать в виде

$$C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \approx \sum_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_{D-1}} H_{\rho_0, i_1, \rho_1}^{(1)} \cdot H_{\rho_1, i_2, \rho_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot H_{\rho_{D-1}, i_D, \rho_D}^{(D)}, \quad \rho_0 = \rho_D = 1. \quad (7)$$

Пусть индексы ρ_λ для $\lambda = \overline{0, D}$ изменяются в пределах $\overline{1, R_\lambda}$. Числа R_λ называются рангами ТТ-разложения (7). Минимальные возможные R_λ среди всех точных разложений указанного вида называются ТТ-рангами тензора $C^{(D)}$. Тензоры $H^{(\lambda)} = [H_{\rho_{\lambda-1}, i_\lambda, \rho_\lambda}^{(\lambda)}] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N \times R_\lambda}$ называются факторами (или ядрами) ТТ-разложения (7). Если $R = \max \{R_\lambda : \lambda = \overline{0, D}\}$, то разложение задается $O(DR^2N)$ параметрами. Для рассматриваемого представления существует устойчивый метод аппроксимации тензора $C^{(D)}$ по части его элементов, требующий $O(D^2R^2N + DR^3N)$ операций [20].

Важно отметить, что если число R задает значение канонического ранга тензора $C^{(D)}$, то все ранги Таккера и ТТ-ранги указанного тензора ограничены величиной R сверху [19]. С учетом данного обстоятельства приводится сводная табл. 1 основных свойств рассмотренных тензорных разложений (5)–(7). Ясно, что если удалось найти приближенное каноническое разложение, то его применение снизит затраты на объема требуемой памяти.

3. Методы ускорения вычислений в разностной схеме предиктор–корректор. В этом разделе на примере ядра $C^{(D)}$ показывается, как с помощью разложений (5)–(7) из раздела 2 может быть снижена алгоритмическая сложность вычисления операторов $\mathcal{P}_N^{(D)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(D)}$. Приводятся алгоритмы 1–4 вычисления указанных операторов с использованием тензорных аппроксимаций. В этих алгоритмах используются следующие операции с векторами: дискретная свертка, поэлементное умножение, сложение векторов, умножение на скаляр, а также операция умножения матрицы на вектор, в том числе умножение степеней матрицы сдвига $L = [l_{ij}]$ на вектор, где $l_{ij} = \delta_{i, j+1}$ и δ_{ij} — символ Кронекера. Дискретная свертка векторов из N элементов может быть вычислена с помощью быстрого дискретного преобразования Фурье за $O(N \log N)$ арифметических операций [21]. Умножение степени матрицы сдвига на вектор можно выполнить за $O(N)$ операций.

Таблица 1

Сравнение тензорных разложений для D -мерного массива
размера $N \times N \times \dots \times N$ 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 (ТТ)	$O(DR^2N)$	$O(DR^3N)$	Известны

В обозначениях $I_\lambda = i_1 + i_2 + \dots + i_\lambda$ компоненты оператора $D! \cdot \mathcal{P}_N^{(D)}$ могут быть записаны в виде

$$D \cdot p_k^{(D)} = \sum_{i_1=1}^{k-D+1} \sum_{i_2=1}^{k-D+2-I_1} \dots \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-I_{D-3}} \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-I_{D-2}} C_{i_1, i_2, \dots, i_{D-1}, k-I_{D-1}}^{(D)} n_{i_1} n_{i_2} \dots n_{i_{D-1}} n_{k-I_{D-1}}, \quad k = \overline{1, N}.$$

Здесь равенство $p_k^{(D)} = 0$ заведомо выполнено, если $k = \overline{1, D-2}$.

Пусть для ядра $C^{(D)}$ известны аппроксимации каноническим разложением вида (5) и разложением Таккера вида (6). Если подставить указанные разложения в формулу для компонент и изменить порядок суммирования, то в обозначениях $\hat{u}_{i,\rho}^{(\lambda)} = u_{i,\rho}^{(\lambda)} \cdot n_i$ и $\hat{v}_{i,\rho}^{(\lambda)} = v_{i,\rho}^{(\lambda)} \cdot n_i$ можно получить следующие приближенные равенства:

$$D! \cdot p_k^{(D)} \approx \sum_{\rho=1}^R \left[\sum_{i_1=1}^{k-D+1} \hat{u}_{i_1, \rho}^{(1)} \dots \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-I_{D-3}} \hat{u}_{i_{D-2}, \rho}^{(D-2)} \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-I_{D-2}} \hat{u}_{i_{D-1}, \rho}^{(D-1)} \cdot \hat{u}_{k-I_{D-1}, \rho}^{(D)} \right], \quad (8)$$

$$D! \cdot p_k^{(D)} \approx \sum_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D} G_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D} \cdot \left[\sum_{i_1=1}^{k-D+1} \hat{v}_{i_1, \rho_1}^{(1)} \dots \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-I_{D-3}} \hat{v}_{i_{D-2}, \rho_{D-2}}^{(D-2)} \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-I_{D-2}} \hat{v}_{i_{D-1}, \rho_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \hat{v}_{k-I_{D-1}, \rho_D}^{(D)} \right]. \quad (9)$$

Можно заметить, что для номера компоненты $k = \overline{D-1, N}$ слагаемое в квадратных скобках при каждом $\rho = \overline{1, R}$ из правой части соотношения (8) является элементом под номером $k - D + 2$ итерированной дискретной свертки $\hat{\mathbf{u}}_\rho^{(1)} * \hat{\mathbf{u}}_\rho^{(2)} * \dots * \hat{\mathbf{u}}_\rho^{(D)} \in \mathbb{R}^N$, где $\hat{\mathbf{u}}_\rho^{(\lambda)} = [\hat{u}_{1,\rho}^{(\lambda)}, \hat{u}_{2,\rho}^{(\lambda)}, \dots, \hat{u}_{N,\rho}^{(\lambda)}]^T$. На данном наблюдении основывается алгоритм 1 приближенного вычисления компонент оператора $\mathcal{P}_N^{(D)}$ сразу при всех $k = \overline{1, N}$ сложности $O(DRN \log N)$ арифметических операций. При этом сложность наивного вычисления компонент составляет $O(N^D)$.

Аналогичным образом может быть построен алгоритм сложности $O(DR^D N \log N)$ на основе соотношения (9). Учтем, что для $k = \overline{D-1, N}$ слагаемое в квадратных скобках из правой части соотношения (9) при каждом $\rho = \overline{1, R}$ является элементом под номером $k - D + 2$ вектора $\hat{\mathbf{v}}_{\rho_1}^{(1)} * \hat{\mathbf{v}}_{\rho_2}^{(2)} * \dots * \hat{\mathbf{v}}_{\rho_D}^{(D)} \in \mathbb{R}^N$, где $\hat{\mathbf{v}}_{\rho_\lambda}^{(\lambda)} = [\hat{v}_{1,\rho_\lambda}^{(\lambda)}, \hat{v}_{2,\rho_\lambda}^{(\lambda)}, \dots, \hat{v}_{N,\rho_\lambda}^{(\lambda)}]^T$.

Пусть теперь для ядра $C^{(D)}$ известна аппроксимация ТТ-разложением вида (7). По аналогии с аппроксимациями (5) и (6) в обозначениях $\hat{h}_{\rho_\lambda-1, i, \rho_\lambda}^{(\lambda)} = h_{\rho_\lambda-1, i, \rho_\lambda}^{(\lambda)} \cdot n_i$ можно прийти к соотношениям

$$D! \cdot p_k^{(D)} \approx \sum_{\rho_1} \sum_{i_1=1}^{k-D+1} \hat{h}_{\rho_0, i_1, \rho_1}^{(1)} \dots \sum_{\rho_{D-2}} \sum_{i_{D-2}=1}^{k-2-I_{D-3}} \hat{h}_{\rho_{D-3}, i_{D-2}, \rho_{D-2}}^{(D-2)} \cdot \sum_{\rho_{D-1}} \sum_{i_{D-1}=1}^{k-1-I_{D-2}} \hat{h}_{\rho_{D-2}, i_{D-1}, \rho_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \hat{h}_{\rho_{D-1}, k-I_{D-1}, \rho_D}^{(D)}.$$

Таким образом, одновременно для всех $k = \overline{D-1, N}$ значение компоненты $p_k^{(D)}$ вычисляется в ходе последовательного по λ применения дискретных сверток по модовому индексу i_λ и суммирования полученных результатов вдоль рангового индекса ρ_λ . Указанный вычислительный процесс описан в алгоритме 2. Его полная сложность составляет $O(DR^2 N \log N)$ арифметических операций.

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

Вход: Факторы $U^{(\lambda)} = \left[\mathbf{u}_\rho^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{N \times R}$ приближенного канонического разложения тензора $C^{(D)}$,

где $\mathbf{u}_\rho^{(\lambda)} = \left[u_{1,\rho}^{(\lambda)}, u_{2,\rho}^{(\lambda)}, \dots, u_{N,\rho}^{(\lambda)} \right]^T$; вектор концентраций $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$

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

- 1: **Функция** Свертка в CP-формате $(U^{(1)}, U^{(2)}, \dots, U^{(D)}, \mathbf{n}_N)$
- 2: $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$ $\triangleright O(N)$ операций
- 3: **Для каждого** $\rho \leftarrow 1, 2, \dots, R$ **выполнить**
- 4: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{u}_\rho^{(D)} \circ \mathbf{n}_N$ \triangleright Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 5: **Для каждого** $\lambda \leftarrow D-1, D-2, \dots, 1$ **выполнить**
- 6: $\mathbf{z} \leftarrow \mathbf{u}_\rho^{(\lambda)} \circ \mathbf{n}_N$ \triangleright Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 7: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{y} * \mathbf{z}$ \triangleright Дискретная свертка, $O(N \log N)$ операций
- 8: **Конец цикла**
- 9: $\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{x} + \mathbf{y}$ $\triangleright O(N)$ операций
- 10: **Конец цикла**
- 11: $\mathbf{x} \leftarrow \frac{1}{D!} L^{D-1} \mathbf{x}$ \triangleright Умножение матрицы сдвига с коэффициентом на вектор, $\triangleright O(N)$ операций
- 12: **Возвратить** \mathbf{x}
- 13: **Конец функции**
Полная сложность: $O(DRN \log N)$ арифметических операций

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

Вход: Факторы $H^{(\lambda)} = \left[\mathbf{h}_{\rho_{\lambda-1}, \rho_\lambda}^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{R_{\lambda-1} \times N \times R_\lambda}$ приближенного ТТ-разложения тензора $C^{(D)}$,

где $\mathbf{h}_{\rho_{\lambda-1}, \rho_\lambda}^{(\lambda)} = \left[h_{\rho_{\lambda-1}, i_\lambda, \rho_\lambda}^{(\lambda)} \right]^T \in \mathbb{R}^N$; вектор концентраций $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$

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

- 1: **Функция** Свертка в ТТ-формате $(H^{(1)}, H^{(2)}, \dots, H^{(D)}, \mathbf{n}_N)$
- 2: **Для каждого** $\rho_{D-1} \leftarrow 1, 2, \dots, R_{D-1}$ **выполнить**
- 3: $\mathbf{x}_{\rho_{D-1}}^{(D-1)} \leftarrow \mathbf{h}_{\rho_{D-1}, 1}^{(D)} \circ \mathbf{n}_N$ \triangleright Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 4: **Конец цикла**
- 5: **Для каждого** $\lambda \leftarrow D-1, D-2, \dots, 1$ **выполнить**
- 6: **Для каждого** $\rho_{\lambda-1} \leftarrow 1, 2, \dots, R_{\lambda-1}$ **выполнить**
- 7: $\mathbf{x}_{\rho_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \leftarrow \mathbf{0}$ $\triangleright O(N)$ операций
- 8: **Для каждого** $\rho_\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, R_\lambda$ **выполнить**
- 9: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{h}_{\rho_{\lambda-1}, \rho_\lambda}^{(\lambda)} \circ \mathbf{n}_N$ \triangleright Поэлементное умножение, $O(N)$ операций
- 10: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{x}_{\rho_\lambda}^{(\lambda)} * \mathbf{y}$ \triangleright Дискретная свертка, $O(N \log N)$ операций
- 11: $\mathbf{x}_{\rho_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} \leftarrow \mathbf{x}_{\rho_{\lambda-1}}^{(\lambda-1)} + \mathbf{y}$ $\triangleright O(N)$ операций
- 12: **Конец цикла**
- 13: **Конец цикла**
- 14: **Конец цикла**
- 15: $\mathbf{x}_1^{(0)} \leftarrow \frac{1}{D!} L^{D-1} \mathbf{x}_1^{(0)}$ \triangleright Умножение матрицы сдвига с коэффициентом на вектор, $\triangleright O(N)$ операций
- 16: **Возвратить** $\mathbf{x}_1^{(0)}$
- 17: **Конец функции**
Полная сложность: $O(DR^2N \log N)$ арифметических операций

Как и в случае с приближенным вычислением оператора $\mathcal{P}_N^{(D)}$ для компонент $\mathcal{Q}_N^{(D)}$ при использовании аппроксимаций ядра $C^{(D)}$ каноническим разложением вида (5) и разложением Таккера вида (6) получаются приближенные выражения

$$-(D-1)! \cdot q_k^{(D)} \approx \sum_{\rho=1}^R \left[\sum_{i_1=1}^N \hat{u}_{i_1, \rho}^{(1)} \cdot \sum_{i_2=1}^N \hat{u}_{i_2, \rho}^{(2)} \cdot \dots \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^N \hat{u}_{i_{D-1}, \rho}^{(D-1)} \cdot \hat{u}_{k, \rho}^{(D)} \right], \quad (10)$$

$$-(D-1)! \cdot q_k^{(D)} \approx \sum_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D} G_{\rho_1, \rho_2, \dots, \rho_D}^{(D)} \cdot \left[\sum_{i_1=1}^N \hat{v}_{i_1, \rho_1}^{(1)} \cdot \sum_{i_2=1}^N \hat{v}_{i_2, \rho_2}^{(2)} \cdot \dots \cdot \sum_{i_{D-1}=1}^N \hat{v}_{i_{D-1}, \rho_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \hat{v}_{k, \rho_D}^{(D)} \right]. \quad (11)$$

Ясно, что суммы по модовым индексам i_λ внутри квадратных скобок из правых частей соотношений (10) и (11) не зависят от индекса k и могут быть вычислены заранее. После этого производится суммирование по соответствующим ранговым индексам ρ либо ρ_λ , что эквивалентно операциям умножения матрицы на вектор. Эффективная организация указанных вычислений компонент $q_k^{(D)}$ оператора $\mathcal{Q}_N^{(D)}$ по формуле (10) предлагается в алгоритме 3 сложности $O(DRN)$. Можно записать аналогичный алгоритм сложности $O(DR^{D-1} + R^D + DRN)$, реализующий вычисления по формуле (11). Сложность вычисления компонент напрямую составляет $O(N^D)$ арифметических операций.

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

Вход: Факторы $U^{(\lambda)} = \left[\mathbf{u}_\rho^{(\lambda)} \right] \in \mathbb{R}^{N \times R}$ приближенного канонического разложения тензора $C^{(D)}$, вектор концентраций $\mathbf{n}_N \in \mathbb{R}^N$

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

- 1: **Функция** Умножение на вектор в CP-формате $(U^{(1)}, U^{(2)}, \dots, U^{(D)}, \mathbf{n}_N)$
 - 2: $\mathbf{y} \leftarrow \mathbf{1}$ ▷ Вектор из единиц, $O(R)$ операций
 - 3: **Для каждого** $\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, D-1$ **выполнить**
 - 4: $\mathbf{z} \leftarrow (U^{(\lambda)})^T \mathbf{n}_N$ ▷ 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: $\mathbf{x} \leftarrow -\frac{1}{(D-1)!} U^{(D)} \mathbf{y}$ ▷ 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
-

При использовании аппроксимации ядра $C^{(D)}$ ТТ-разложением вида (7) имеем соотношения

$$-(D-1)! \cdot q_k^{(D)} \approx \sum_{\rho_1} \sum_{i_1=1}^N \hat{h}_{\rho_0, i_1, \rho_1}^{(1)} \cdot \dots \cdot \sum_{\rho_{D-2}} \sum_{i_{D-2}=1}^N \hat{h}_{\rho_{D-3}, i_{D-2}, \rho_{D-2}}^{(D-2)} \cdot \sum_{\rho_{D-1}} \sum_{i_{D-1}=1}^N \hat{h}_{\rho_{D-2}, i_{D-1}, \rho_{D-1}}^{(D-1)} \cdot \hat{h}_{\rho_{D-1}, k, \rho_D}^{(D)}.$$

Одновременно для всех $k = \overline{1, N}$ значения компонент $q_k^{(D)}$ в последней формуле могут быть приближенно найдены как результат последовательного по λ вычисления пар сумм, сначала по модовому индексу i_λ , а затем по ранговому индексу ρ_λ . Данная схема вычислений лежит в основе алгоритма 4 сложности $O(DR^2N)$ арифметических операций.

В сводной табл. 2 указаны оценки алгоритмической сложности основных операций при работе с тензорными разложениями: получения тензорных представлений для ядер и приближенного вычисления операторов $\mathcal{P}_N^{(D)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(D)}$. Ясно, что объемы вычислений на каждом шаге разностной схемы определяются сложностью сверточного оператора $\mathcal{P}_N^{(D)}$ и составляют $O(DRN \log N)$, $O(DR^D N \log N)$ и $O(DR^2 N \log N)$ операций при использовании для ядра $C^{(D)}$ соответствующих аппроксимаций CP-разложением, разложением Таккера и тензорным поездом.

Таким образом, при учете табл. 1 становится ясно, что для ускорения вычислений лучше использовать точные CP-разложения, если таковые известны. В противном случае для аппроксимаций ядер предпочтительно применение ТТ-разложений, так как известны надежные методы их построения. Однако поскольку

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

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

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

- 1: **Функция** Умножение на вектор в ТТ-формате $(H^{(1)}, H^{(2)}, \dots, H^{(D)}, \mathbf{n}_N)$
 - 2: $\mathbf{y}_D \leftarrow 1$
 - 3: **Для каждого** $\lambda \leftarrow D - 1, \dots, 2$ **выполнить**
 - 4: **Для каждого** $\rho_\lambda \leftarrow 1, 2, \dots, R_\lambda$ **выполнить**
 - 5: $\mathbf{z}_{\rho_\lambda}^{(\lambda)} \leftarrow \mathbf{H}_{\rho_\lambda}^{(\lambda)} \mathbf{n}_N$ \triangleright Умножение матрицы на вектор, $O(RN)$ операций
 - 6: **Конец цикла**
 - 7: $\mathbf{y}_{\lambda-1} \leftarrow \left[\mathbf{z}_1^{(\lambda)}, \mathbf{z}_2^{(\lambda)}, \dots, \mathbf{z}_{R_\lambda}^{(\lambda)} \right] \mathbf{y}_\lambda$ \triangleright Умножение матрицы на вектор, $O(R^2)$ операций
 - 8: **Конец цикла**
 - 9: $\mathbf{x} \leftarrow -\frac{1}{(D-1)!} H^{(1)} \mathbf{y}_1$ \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

Таблица 2

Алгоритмические сложности операций для различных тензорных представлений D -мерного массива размера $N \times N \times \dots \times N$ ранга R

Разложение	Сложность аппроксимации	Сложность вычисления оператора $\mathcal{P}_N^{(D)}$	Сложность вычисления оператора $\mathcal{Q}_N^{(D)}$
Каноническое (CP)	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)	$O(DR^3N)$	$O(DR^2N \log N)$	$O(DR^2N)$

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.

4. Численные эксперименты для модельных задач. В этом разделе приводятся результаты численных экспериментов для реализаций разностной схемы предиктор–корректор (4) на основе тензорных разложений для задачи Коши системы кинетических уравнений (3) типа Смолуховского, допускающей столкновения только D частиц при $D = 2, 3, 4, 5$. Кроме того, рассматриваются реализации для общей схемы, допускающей столкновения любого числа $d = \overline{2, D}$ частиц. В качестве начальных условий были выбраны монодисперсные $n_{k,0} = \delta_{1,k}$. Следующие три типа тестовых массивов кинетических коэффициентов (ядер) $C^{(d)}$ использовались для расчетов:

$$C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)} \equiv 1; \tag{12}$$

$$C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(d)}^{\mu_d}, \quad \mu_\lambda = 0.45 - 0.1\lambda, \quad \lambda = \overline{2, d}; \tag{13}$$

$$C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)} = (i_1 + i_2 + \dots + i_d)^\alpha, \quad \alpha = 0.5. \tag{14}$$

Сумма в формуле (13) предполагается по всем перестановкам $\sigma: \{1, 2, \dots, d\} \rightarrow \{1, 2, \dots, d\}$. Необходимо отметить, что CP- и ТТ-реализации разностной схемы при $D = 2$ эквивалентны в силу совпадения используемых разложений. Данный случай уже был рассмотрен в работе [11]. 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 (12) и (13). Для каждого из двух типов ядер приводятся времена расчета для реализаций разностной схемы предиктор–корректор на основе рассматриваемых разложений. Кроме того, указывается время построения приближенного ТТ-разложения. При известном аналитическом решении в случае ядер (12), монодисперсных начальных условий и допустимых столкновений D -частиц оценивается относительная погрешность полной концентрации агрегатов. Для ядер типа (13) оценивается относительная разность полной концентрации $|n_{СР} - n_{ТТ}|/n_{СР}$ двух реализаций схемы. Кроме того, приводятся измерения ранга полученных ТТ-аппроксимаций для ядер вида (13) и (14). В данной работе отсутствуют эксперименты с разложением Таккера, неэффективность которого для рассматриваемой задачи уже была показана в разделе 3. Все расчеты были выполнены на персональном компьютере (4-ядерный процессор Intel Core i5-330s CPU@2.70 ГГц).

Таблица 3

Сравнение времен расчета (в секундах) для реализаций схемы предиктор–корректор в зависимости от допустимого количества D частиц, участвующих в одном взаимодействии⁵

D	Тип ядра	(I) Постоянное				(II) Обобщенного умножения				
		Число уравнений N	2^{14}	2^{15}	2^{16}	2^{17}	2^{14}	2^{15}	2^{16}	2^{17}
2	СР-схема		0.25	0.47	0.93	2.43	0.39	0.70	1.72	4.07
	ТТ-схема		0.75	1.61	3.62	8.27	0.89	2.18	4.85	12.65
	ТТ-аппроксимация		0.13	0.25	0.48	0.98	0.38	0.73	1.44	2.77
3	СР-схема		0.24	0.45	0.98	2.61	0.55	0.95	2.50	5.21
	ТТ-схема		1.43	3.08	7.11	15.54	4.53	11.30	29.46	77.59
	ТТ-аппроксимация		0.21	0.41	0.80	1.38	3.50	7.16	13.05	27.72
4	СР-схема		0.28	0.54	1.13	2.86	0.68	1.27	3.31	6.32
	ТТ-схема		2.12	4.58	10.06	23.00	16.24	47.28	128.4	331.6
	ТТ-аппроксимация		0.30	0.59	1.15	1.81	50.53	108.4	217.0	445.7
5	СР-схема		0.31	0.58	1.24	3.10	0.72	1.61	3.98	8.41
	ТТ-схема		2.80	5.91	13.04	29.99	55.17	166.4	451.6	1286.0
	ТТ-аппроксимация		0.37	0.74	1.38	2.26	976.1	2060.1	4082.0	8425.4

В табл. 3 приведены измерения времен расчета для СР и ТТ-реализаций схемы предиктор–корректор, допускающей только D -частичные столкновения агрегатов. Схема построена для постоянных ядер вида (12) и ядер обобщенного умножения вида (13) при монодисперсных начальных условиях $n_{k,0} = \delta_{1,k}$. В данном случае каждое из ядер (12) задается точным каноническим разложением ранга $R = 1$, при этом максимальный ТТ-ранг для указанного ядра тоже равен 1. В формулах (13) ядра $C^{(d)}$ формально представлены точными каноническими разложениями ранга $d!$, однако в силу вида фактор-матриц $U^{(\lambda)}$ нет необходимости использовать в вычислениях операторов $\mathcal{P}_N^{(d)}$ и $\mathcal{Q}_N^{(d)}$ более одного слагаемого для каждого из указанных разложений.

⁵ Схемы построены на основе точного СР-разложения и приближенного ТТ-разложения ядра $C^{(D)}$ вида (I) $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \equiv 1$ и (II) $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$ (сумма по всем перестановкам σ), а также $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$, $\lambda = \overline{2, D}$. 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 $\Delta t = 0.01$ и число итераций $T = 100$.

Таблица 4

Сравнение рангов ТТ-аппроксимаций для массивов кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$, $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$, $\lambda = \overline{2, D}$ в зависимости от

точности ε приближения массива по норме и количества задействованных уравнений N

N	ε при $D = 2$			ε при $D = 3$			ε при $D = 4$			ε при $D = 5$		
	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}
2^{14}	2	2	2	3	3	3	6	6	6	8	9	10
2^{15}	2	2	2	3	3	3	6	6	6	9	9	10
2^{16}	2	2	2	3	3	3	6	6	6	9	10	10
2^{17}	2	2	2	3	3	3	6	6	6	9	10	10

На рис. 1 представлены изменения времен расчета для схемы на основе приближенного ТТ-разложения ядер вида (13), допускающей только D -частичные столкновения агрегатов. В табл. 4 для ядер вида (13) приводятся измерения рангов ТТ-аппроксимаций в зависимости от точности приближения ε ядер по фробениусовой норме и числа задействованных уравнений N .

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

Известно, что в случае начальных условий $n_{k,0} = \delta_{1,k}$ (называемых монодисперсными; через δ_{ij} обозначен символ Кронекера) и коэффициентов $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \equiv 1$ решение D -частичной задачи Коши (2), (3) определяется соотношениями

$$n_{k=1+s(D-1)}(t) = \frac{\Gamma(k \cdot (D-1)^{-1})}{\Gamma((D-1)^{-1})\Gamma(s+1)} \cdot (n(t))^{D \cdot (D-1)^{-1}} \cdot (1 - n(t))^s, \quad s = \overline{0, \infty}; \tag{15}$$

$$n_{k \neq 1+s(D-1)}(t) \equiv 0, \quad s = \overline{0, \infty}; \quad n(t) = (1 + (D-1)^2 \cdot (D!)^{-1} \cdot t)^{-(D-1)^{-1}}.$$

Здесь $\Gamma(\cdot)$ обозначает гамма-функцию. Тривиальность всех концентраций $n_{k \neq 1+s(D-1)}$ естественным образом следует из выбора начального условия, отсутствия процесса фрагментации и наличия только D -частичных столкновений.

В табл. 5 приведены измерения относительной погрешности аппроксимации полной концентрации $n(t)$ агрегатов в различные моменты времени t для задачи Коши с постоянными кинетическими коэффициентами

⁶ Кинетические коэффициенты $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(D)}^{\mu_D}$, $\mu_{\lambda} = 0.45 - 0.1\lambda$, $\lambda = \overline{2, D}$;

начальные условия $n_{k,0} = \delta_{1,k}$, шаг $\Delta t = 0.01$, число итераций $T = 100$.

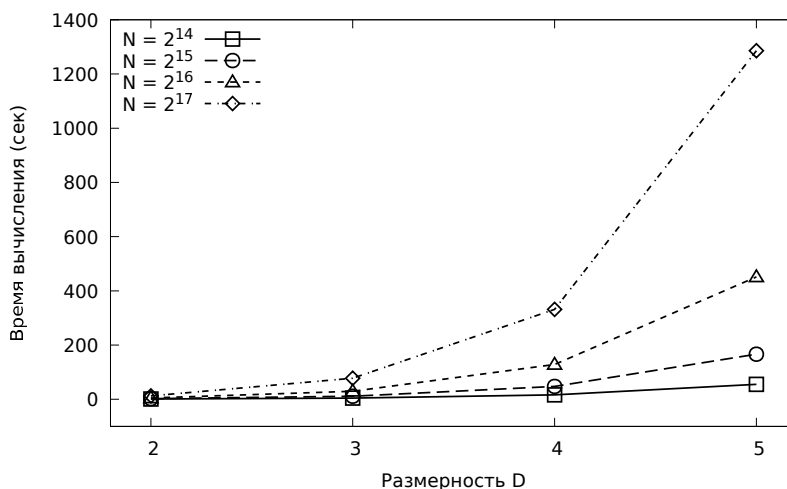


Рис. 1. Измерение времен расчета (без учета времени аппроксимации) для реализации схемы предиктор–корректор на основе приближенного ТТ-разложения в зависимости от допустимого количества D частиц, участвующих в одном взаимодействии⁶

ентами $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \equiv 1$ и монодисперсными начальными условиями $n_{k,0} = \delta_{1,k}$. Расчеты показали согласованность кластерной плотности численного решения и аналитического решения (15). При этом полные концентрации численных решений для реализаций на основе обоих разложений совпадают с машинной точностью.

Таблица 5
Измерения относительной погрешности $|n - n_{\text{CP}}|/n$ аппроксимации полной концентрации агрегатов n в зависимости от времени для CP-реализации D -частичной схемы предиктор–корректор при известном аналитическом решении⁷

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

В случае ядер типа (13) неизвестно аналитическое решение задачи Коши. В табл. 6 для указанных ядер оценивается относительная разность полной концентрации $|n_{\text{CP}} - n_{\text{TT}}|/n_{\text{CP}}$ агрегатов для двух реализаций схемы. В данной схеме учитываются столкновения любого числа частиц $d = \overline{2, D}$. Расчеты подтверждают совпадение кластерных плотностей численных решений.

Таблица 6
Измерения относительной разности $|n_{\text{CP}} - n_{\text{TT}}|/n_{\text{CP}}$ аппроксимаций полной концентрации агрегатов в зависимости от времени для задачи Коши⁸

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

Прежде чем перейти к рассмотрению численных экспериментов для ядер типа (14), необходимо привести формулировку теоремы, доказательство которой можно найти в работе [22].

Теорема 1. Для величин $\varepsilon > 0$, $\beta > 0$ и $K > 1$ найдутся веса w_μ и показатели s_μ для $\mu = \overline{1, M}$, где $M = O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log K)$, при которых $\left| k^{-\beta} - \sum_{\mu=1}^M w_\mu e^{-s_\mu k} \right| \leq \varepsilon \cdot k^{-\beta}$ для любых $k \in [1, K]$.

Следствием данной теоремы является следующая

Теорема 2. Массив $C^{(D)}$ кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} = (i_1 + i_2 + \dots + i_D)^\alpha$ для величин $\varepsilon > 0$ и $\alpha \in (0, 1)$ может быть приближен с относительной погрешностью ε по фробениусовой норме каноническим разложением ранга DM , где $M = O(\log \varepsilon^{-1} \cdot \log DN)$.

Доказательство. Имеет место тождество $I_D^\alpha \equiv I_D^{\alpha-1} \cdot I_D$, где $I_D = i_1 + i_2 + \dots + i_D$. Для аппроксимации

⁷ Кинетические коэффициенты $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} \equiv 1$, начальные условия $n_{k,0} = \delta_{1,k}$, число уравнений $N = 2^{17}$, шаг $\Delta t = 0.01$. Полные концентрации n_{CP} и n_{TT} численных решений CP и TT-реализаций совпадают с машинной точностью.

⁸ С кинетическими коэффициентами $C_{i_1, i_2, \dots, i_d}^{(d)} = \sum_{\sigma} i_{\sigma(1)}^{\mu_1} \cdot i_{\sigma(2)}^{\mu_2} \cdot \dots \cdot i_{\sigma(d)}^{\mu_d}$, $\mu_\lambda = 0.45 - 0.1\lambda$, $\lambda = \overline{2, d}$ для всех $d = \overline{2, D}$ и начальными условиями $n_{k,0} = \delta_{1,k}$. Число уравнений $N = 2^{17}$, шаг $\Delta t = 0.01$.

величины $I_D^{\alpha-1}$ можно применить теорему 1 при $k = I_D$ и $\beta = 1 - \alpha$. Поэтому

$$(i_1 + i_2 + \dots + i_D)^\alpha \equiv I_D^{\alpha-1} \cdot I_D \approx \sum_{\mu=1}^M w_\mu e^{-s_\mu I_D} \cdot I_D \equiv \sum_{\lambda=1}^D \sum_{\mu=1}^M i_\lambda w_\mu \cdot e^{-s_\mu i_1} \cdot e^{-s_\mu i_2} \cdot \dots \cdot e^{-s_\mu i_D}.$$

Что и требовалось доказать. \square

Таблица 7

Сравнение рангов ТТ-аппроксимаций для массивов кинетических коэффициентов

$C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} = (i_1 + i_2 + \dots + i_D)^\alpha$ при $\alpha = 0.5$ в зависимости от точности ε приближения по норме и количества задействованных уравнений N

N	ε при $D = 2$			ε при $D = 3$			ε при $D = 4$			ε при $D = 5$		
	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}	10^{-7}
2^{14}	13	13	18	13	16	18	13	14	18	13	16	18
2^{15}	13	16	18	14	17	19	13	16	19	13	16	19
2^{16}	14	13	17	13	16	19	13	16	20	14	16	20
2^{17}	14	16	18	14	17	20	13	16	20	13	16	20

Из последней теоремы немедленно следуют оценки на ТТ-ранги ядер типа (14). Данный факт имеет место, поскольку максимальный ТТ-ранг ядра $C^{(D)}$ ограничен сверху значением его канонического ранга R , что уже было отмечено в разделе 2. В табл. 7 для ядер указанного вида представлены измерения рангов ТТ-аппроксимаций, соответствующие приведенным выше оценкам.

Измерения для числа уравнений $N = 2^{17}$ иллюстрируются на рис. 2. 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.

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

5. Заключение. В настоящей статье рассмотрена задача агрегационной кинетики, сформулированная в классе обобщенных уравнений Смолуховского, допускающих множественные взаимодействия агрегатов. При использовании быстрых алгоритмов вычисления дискретных сверток массивов и алгоритмов тензорных аппроксимаций построен численный метод, снижающий асимптотику сложности шага разностной схемы Рунге–Кутты второго порядка с $O(N^D)$ до $O(DR^2 N \log N)$ арифметических операций, где D определяет максимальное число частиц, участвующих в одном взаимодействии, N задает число

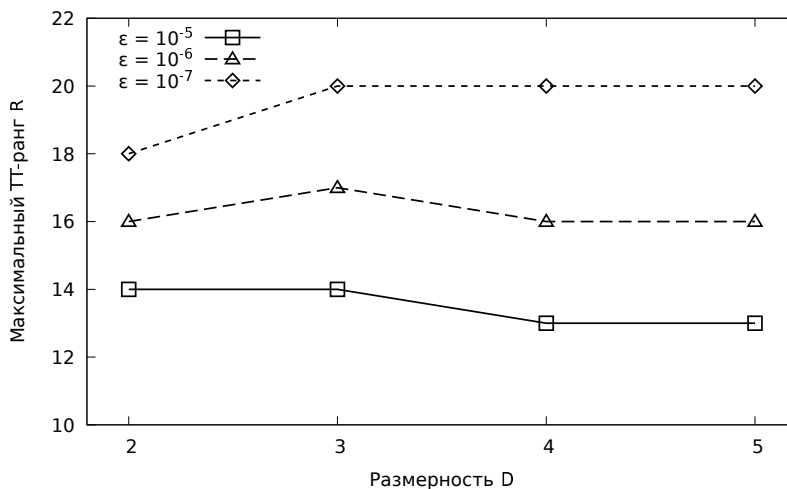


Рис. 2. Сравнение рангов ТТ-аппроксимаций для массивов кинетических коэффициентов $C_{i_1, i_2, \dots, i_D}^{(D)} = (i_1 + i_2 + \dots + i_D)^\alpha$ при $\alpha = 0.5$ в зависимости от точности ε приближения по норме. Количество уравнений $N = 2^{17}$

уравнений в конечной системе, аппроксимирующей исходную бесконечную систему обыкновенных дифференциальных уравнений, R является максимальным рангом используемых приближений для массивов кинетических коэффициентов. Предложенный численный метод задействует только $O(DR^2N)$ ячеек памяти вместо $O(N^D)$ для исходной разностной схемы. Более того, если для используемого массива кинетических коэффициентов может быть найдено каноническое разложение ранга R , то алгоритмическая сложность шага может быть уменьшена до $O(DRN \log N)$ при задействовании $O(DRN)$ ячеек памяти.

Разработанный метод может быть использован для численного решения широкого класса задач, допускающих множественные столкновения. Метод может быть адаптирован на случай наличия процесса фрагментации, источников и стоков частиц.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 14-11-00806).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Галкин В.А. Уравнение Смолуховского. М.: Физматлит, 2001.
2. Leyvraz F. Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation // *Physics Reports*. 2003. **383**, N 2/3. 95–212.
3. Smoluchowski M. Versuch Einer Mathematischen Theorie der Koagulationskinetik Kolloider Lösungen // *Z. Phys. Chem.* 1917. **92**. 129–168.
4. Krapivsky P.L. Aggregation processes with n -particle elementary reactions // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1991. **24**, N 19. 4697–4703.
5. Krapivsky P.L., Redner S., Ben-Naim E. A kinetic view of statistical physics. Cambridge: Cambridge University Press, 2010.
6. Jiang Y., Gang Hu. Generalized Smoluchovski equation with gelation // *Physical Review B*. 1989. **39**, N 7. 4659–4665.
7. Melzak Z.A. A scalar transport equation // *Transactions of the American Mathematical Society*. 1957. **85**, N 2. 547–560.
8. Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtshnikov E.E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // *Journal of Computational Physics*. 2015. **282**. 23–32.
9. Kruis F.E., Maisels A., Fissan H. Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation // *AIChE Journal*. 2000. **46**, N 9. 1735–1742.
10. Palaniswamy G., Loyalka S.K. Direct simulation Monte Carlo aerosol dynamics: coagulation and collisional sampling // *Nuclear Technology*. 2006. **156**, N 1. 29–38.
11. Матвеев С.А., Тьртшников Е.Е., Смирнов А.П., Бриллиантов Н.В. Быстрый метод решения уравнений агрегационно-фрагментационной кинетики типа уравнений Смолуховского // *Вычислительные методы и программирование*. 2014. **15**. 1–8.
12. Стефонишин Д.А., Матвеев С.А., Смирнов А.П., Тьртшников Е.Е. Эффективный разностный метод численного решения уравнений агрегации с учетом трехчастичных столкновений // *Вычислительные методы и программирование*. 2018. **19**. 261–269.
13. Hitchcock F.L. Multiple invariants and generalized rank of a p -way matrix or tensor // *J. Math. Phys.* 1927. **7**, N 1. 39–79.
14. Harshman R.A. Foundations of the PARAFAC procedure: models and conditions for an “explanatory” multimodal factor analysis. Los Angeles: University of California at Los Angeles, 1970.
15. Beylkin G., Mohlenkamp M.J. Algorithms for numerical analysis in high dimensions // *SIAM J. Sci. Comput.* 2005. **26**, N 6. 2133–2159.
16. Tucker L.R. Some mathematical notes on three-mode factor analysis // *Psychometrika*. 1966. **31**, N 3. 279–311.
17. de Lathauwer L., de Moor B., Vandewalle J. A multilinear singular value decomposition // *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 2000. **21**, N 4. 1253–1278.
18. Oseledets I.V., Tyrtshnikov E.E. Breaking the curse of dimensionality, or how to use SVD in many dimensions // *SIAM J. Sci. Comput.* 2009. **31**, N 5. 3744–3759.
19. Oseledets I.V. Tensor-train decomposition // *SIAM J. Sci. Comput.* 2011. **33**, N 5. 2295–2317.
20. Oseledets I., Tyrtshnikov E. TT-cross approximation for multidimensional arrays // *Linear Algebra and Its Applications*. 2008. **432**, N 1. 70–88.
21. Tyrtshnikov E.E. A brief introduction to numerical analysis. Basel: Birkhäuser, 2012.
22. Beylkin G., Monzón L. On approximation of functions by exponential sums // *Applied and Computational Harmonic Analysis*. 2005. **19**, N 1. 17–48.

Поступила в редакцию
18.06.2018

Tensor Decompositions for Solving the Equations of Mathematical Models of Aggregation with Multiple Collisions of Particles

D. A. Stefonishin¹, S. A. Matveev², A. P. Smirnov³,
and E. E. Tyrtysnikov⁴

¹ *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Graduate Student, e-mail: stefonishin@gmail.com*

² *Skolkovo Institute of Science and Technology; ulitsa Nobelya, 3, Skolkovo Innovation Center, Moscow Region, 121205, Russia; Ph.D., Junior Scientist, e-mail: s.matveev@skoltech.ru*

³ *Lomonosov Moscow State University, Faculty of Computational Mathematics and Cybernetics; Leninskie Gory, Moscow, 119992, Russia; Ph.D., Associate Professor, e-mail: sap@cs.msu.su*

⁴ *Marchuk Institute of Numerical Mathematics, Russian Academy of Sciences; ulitsa Gubkina 8, Moscow, 119333, Russia; Dr. Sci., Professor, Academician of Russian Academy of Sciences, Director, e-mail: eugene.tyrtysnikov@gmail.com*

Received June 18, 2018

Abstract: Efficient methods for the numerical solving of a Cauchy problem for systems of Smoluchowski-type kinetic equations of aggregation with multiple collisions of particles are proposed. The developed methods are based on the tensor representations of kinetic coefficient arrays. The canonical, Tucker, and tensor train (TT) decompositions are compared. The computational complexity of these tensor representations is estimated for a second-order Runge–Kutta. The efficiency of the proposed methods for the systems with collisions of up to five particles is shown in a series of numerical experiments for the canonical and TT-decompositions.

Keywords: multiple collision Smoluchowski equation, kinetics of aggregation processes, predictor–corrector scheme, low-rank tensor approximations, discrete convolution.

References

1. V. A. Galkin, *Smoluchowski equation* (Fizmatlit, Moscow, 2001) [in Russian].
2. F. Leyvraz, “Scaling Theory and Exactly Solved Models in the Kinetics of Irreversible Aggregation,” *Phys. Rep.* **383** (2–3), 95–212 (2003).
3. M. Smoluchowski, “Versuch Einer Mathematischen Theorie der Koagulationskinetik Kolloider Lösungen,” *Z. Phys. Chem.* **92**, 129–168 (1918).
4. P. L. Krapivsky, “Aggregation Processes with n -Particle Elementary Reactions,” *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** (19), 4697–4703 (1991).
5. P. L. Krapivsky, S. Redner, and E. Ben-Naim, *A Kinetic View of Statistical Physics* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2010).
6. Y. Jiang and H. Gang, “Generalized Smoluchovski Equation with Gelation,” *Phys. Rev. B: Condens. Matter* **39** (7), 4659–4665 (1989).
7. Z. A. Melzak, “A Scalar Transport Equation,” *Trans. Am. Math. Soc.* 1957. **85** (2), 547–560 (1957).
8. S. A. Matveev, A. P. Smirnov, and E. E. Tyrtysnikov, “A Fast Numerical Method for the Cauchy Problem for the Smoluchowski Equation,” *J. Comput. Phys.* **282**, 23–32 (2015).
9. F. E. Kruijs, A. Maisels, and H. Fissan, “Direct Simulation Monte Carlo Method for Particle Coagulation and Aggregation,” *AIChE J.* **46** (9), 1735–1742 (2000).
10. G. Palaniswamy and S. K. Loyalka, “Direct Simulation Monte Carlo Aerosol Dynamics: Coagulation and Collisional Sampling,” *Nucl. Technol.* **156** (1), 29–38 (2006).
11. S. A. Matveev, E. E. Tyrtysnikov, A. P. Smirnov, and N. V. Brilliantov, “A Fast Numerical Method for Solving the Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation and Fragmentation Processes,” *Vychisl. Metody Programm.* **15**, 1–8 (2014).
12. D. A. Stefonishin, S. A. Matveev, A. P. Smirnov, and E. E. Tyrtysnikov, “An Efficient Finite-Difference Method for Solving Smoluchowski-Type Kinetic Equations of Aggregation with Three-Body Collisions,” *Vychisl. Metody Programm.* **19**, 261–269 (2018).
13. F. L. Hitchcock, “Multiple Invariants and Generalized Rank of a p -Way Matrix or Tensor,” *J. Math. Phys.* **7** (1), 39–79 (1927).

14. R. A. Harshman, *Foundations of the PARAFAC Procedure: Models and Conditions for an “Explanatory” Multimodal Factor Analysis* (Univ. of California at Los Angeles, Los Angeles, 1970).
15. G. Beylkin and M. J. Mohlenkamp, “Algorithms for Numerical Analysis in High Dimensions,” *SIAM J. Sci. Comput.* **26** (6), 2133–2159 (2005).
16. L. R. Tucker, “Some Mathematical Notes on Three-Mode Factor Analysis,” *Psychometrika* **31** (3), 279–311 (1966).
17. L. de Lathauwer, B. de Moor, and J. Vandewalle, “A Multilinear Singular Value Decomposition,” *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* **21** (4), 1253–1278 (2000).
18. I. V. Oseledets and E. E. Tyrtshnikov, “Breaking the Curse of Dimensionality, Or How to Use SVD in Many Dimensions,” *SIAM J. Sci. Comput.* **31** (5), 3744–3759 (2009).
19. I. V. Oseledets, “Tensor-Train Decomposition,” *SIAM J. Sci. Comput.* **33** (5), 2295–2317 (2011).
20. I. V. Oseledets and E. E. Tyrtshnikov, “TT-Cross Approximation for Multidimensional Arrays,” *Linear Algebra Appl.* **432** (1), 70–88 (2010).
21. E. E. Tyrtshnikov, *A Brief Introduction to Numerical Analysis* (Birkhäuser, Basel, 2012).
22. G. Beylkin and L. Monzón, “On Approximation of Functions by Exponential Sums,” *Appl. Comput. Harmon. Anal.* **19** (1), 17–48 (2005).