МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
им. М.В. ЛОМОНОСОВА

*На правах рукописи*

**Тимохин Иван Владиславович**

# Матрицы специального вида и быстрые алгоритмы при численном решении уравнений типа Смолуховского

Специальность 05.13.18 Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук

Москва, 2021

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

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

**Официальные оппоненты**: ***Богомолов Сергей Владимирович***, *д. ф.-м. н., доцент, профессор кафедры вычислительных методов факультета вычислительной математики и кибернетики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова»*

***Загайнов Валерий Анатольевич***, *д. ф.-м. н., старший научный сотрудник, профессор кафедры общей физики института общей профессиональной подготовки федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“»*

***Рахуба Максим Владимирович***, *к. ф.-м. н., доцент департамента больших данных и информационного поиска факультета компьютерных наук федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет „Высшая школа экономики“»*

Защита состоится 18 мая 2022 года в 15 часов 30 минут на заседании диссертационного совета МГУ.01.09 Московского Государственного Университета им. М.В. Ломоносова по адресу: Российская Федерация, 119991, Москва, Ленинские горы, д.1, строение 52, факультет ВМК, комната 685

E-mail: ilgova@cs.msu.ru

С диссертацией можно ознакомиться в отделе диссертаций научной библиотеки МГУ имени Ломоносова (г. Москва, Ломоносовский проспект, д. 27) и на сайте ИАС «Истина»: `https://istina.msu.ru/dissertations/447227848/`

Автореферат разослан «____» _____ 2022 года.

Учёный секретарь диссертационного совета МГУ.01.09
доктор физико-математических наук,
член-корреспондент РАН Ильин А. В.

# Общая характеристика работы

Настоящая работа посвящена разработке и программной реализации эффективных численных методов для численного решения систем кинетических уравнений, описывающих процесс агрегации вещества с опорой на специальную структуру участвующих операторов и предполагаемых решений.

## Актуальность темы

Системы соединяющихся каким-либо образом частиц встречаются в природе довольно часто; примерами могут служить образование небесных тел из протопланетных дисков[1][2] и сворачивание крови, образование частиц смога в атмосфере[3] и полимеров в растворах[4], створаживание молока и образование мочевины[5]. Кроме того, используемый для моделирования таких процессов математический формализм оказывается полезен и в других, казалось бы, имеющих достаточно отдалённое отношение к слипающимся частицам задачах. К ним относятся, например, рост трещин в структуре материалов, или формирование социальных связей[6].

Мы же будем рассматривать более общую модель, основанную на предложенной в 1916 году Марианом Смолуховским[7][8] формально бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений, описывающей эволюцию концентраций частиц различных масс в пространственно-однородной системе, при абсолютно неупругих столкновениях отдельных частиц в результате их хаотического движения. За прошедший век были предложены различные модификации базовой модели — например, был предложен[9] вариант с непрерывным спектром масс — и различные

[1]Стояновская О.П., Снытников В.Н. Численное моделирование образования уединенных вихрей повышенной плотности в околозвездном диске // Вычислительные методы и программирование. — 2012. — Июнь. — Т. 13, № 33. — С. 377–383.

[2]Size distribution of particles in Saturn's rings from aggregation and fragmentation / Brilliantov N. V., Krapivsky P. L., Bodrova A., Spahn F., Hayakawa H., Stadnichuk V., and Schmidt J. // PNAS. — 2015. — Vol. 112, no. 31. — P. 9536–9541.

[3]Shrivastava R. C. A simple model of particle coalescence and breakup // J. Atom. Sci. — 1982. — Vol. 39. — P. 1317.

[4]Blatz P. J., Tobolsky A. V. Note on the kinetics of systems manifesting simultaneous polymerization-depolymerization phenomena // The Journal of Physical Chemistry. — 1945. — Vol. 49, no. 2. — P. 77–80.

[5]A numerical method for the simulation of an aggregation-driven population balance system / Hackbusch Wolfgang, John Volker, Khachatryan Aram, and Suciu Carina // International Journal for Numerical Methods in Fluids. — 2012. — Aug. — Vol. 69. — P. 1646–1660.

[6]Ben-Naim E., Krapivsky P. L. Popularity-driven networking // Europhys. Lett. — 2012. — Vol. 97, no. 4. — P. 48003.

[7]Smoluchowski M. V. Drei vortrage uber diffusion, Brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen // Zeitschrift fur Physik. — 1916. — Bd. 17. — S. 557–585.

[8]Smoluchowski M. V. Attempt for a mathematical theory of kinetic coagulation of colloid solutions // Z. Phys. Chem. — 1917. — Vol. 92. — P. 129.

[9]Müller H. Zur allgemeinen Theorie ser raschen Koagulation // Fortschrittsberichte über Kolloide und Polymere. —

расширенные версии — например, совмещение с распадом частиц. Отдельно отметим обобщение модели Смолуховского на пространственно-неоднородные системы и совмещение её с уравнением переноса[10] — вполне естественное в контексте некоторых из обозначенных выше применений, но весьма затратное с точки зрения построения численного решения.

Первая же сложность, возникающая при попытке численного решения системы уравнений Смолуховского это формально бесконечное число уравнений в ней — классическая модель не подразумевает никакой верхней границы на массу частиц в системе и, в действительности, естественным образом порождает частицы сколь угодно большой массы. (Даже не вдаваясь в подробности устройства модели, это легко увидеть «на пальцах»: поскольку частицы всё время слипаются между собой, максимальная масса частиц в системе постоянно растёт.) Численное решение такой системы «в лоб», конечно, невозможно, а потому на практике приходится ограничивать максимальный размер частиц, «обрезая» систему до конечной.

Отметим, впрочем, что такой переход к конечной системе может быть оправдан не только из соображений вычислительной необходимости, но и в контексте моделируемой системы. В самом деле, в отличие от формальной модели Смолуховского, перечисленные в качестве примеров системы не допускают образования частиц произвольно большой массы — даже если опустить вопрос о почти всегда имеющемся механизме вывода из системы достаточно массивных частиц (например, выпадение осадка из раствора), очевидно, что наличие частиц массой, сопоставимой с общей массой системы (которая на практике всегда конечна), естественным образом нарушит предположение о пространственной однородности системы. Таким образом, в приложениях почти всегда имеется некоторое верхнее ограничение на размер рассматриваемых частиц, если не как результат моделируемых физических процессов, то хотя бы как граница применимости модели. Однако такое верхнее ограничение может всё же быть достаточно большим, чтобы создать серьёзные сложности при моделировании.

Вне зависимости от происхождения конечной системы, таким образом, возникает естественное желание численно решать рассматриваемую систему уравнений как можно большего размера, с как можно большей допустимой массой частиц. Это оказывается достаточно сложным — в исходной формулировке, простое вычисление правой части системы ОДУ типа Смолуховского с $N$ уравнениями требует $O(N^2)$ операций, что очевидным образом накладывает достаточно жёсткие ограничения на размер решаемых систем.

1928. — Bd. 27, nu. 6. — S. 223–250.

[10]Parallel Numerical Algorithm for Solving Advection Equation for Coagulating Particles / Matveev Sergey, Zagidullin Rishat, Smirnov Alexander, and Tyrtyshnikov Eugene // Supercomputing Frontiers and Innovations. — 2018. — Vol. 5, no. 2.

## Степень разработанности темы

Для борьбы с настолько стремительным ростом сложности в контексте необходимости решать системы с десятками тысяч, а, в отдельных задачах, и триллионами уравнений, предлагались весьма разнообразные подходы. Так, например, в некоторых работах предлагается «огрублять» исходную модель, объединяя большие массы частиц в «окна» растущего с массой размера, и приближая концентрации частиц внутри каждого такого окна какой-то достаточно малопараметрической зависимостью от массы, полученной исходя из некоторых априорных соображений о структуре решения. Такой подход позволяет существенно сократить число параметров, используемых для описания системы — с $N$ до $O(\log N)$ — однако требует достаточно точного представления о структуре искомого решения; в отсутствие такой априорной информации точность подхода заметно падает. В эту же категорию «полуаналитических» методов отнесём методы, основанные на производящей функции моментов решения.

В некотором роде противоположны рассмотренным методы типа Монте-Карло, которые можно рассматривать как варианты непосредственного моделирования системы сталкивающихся частиц; такие методы успешно применялись и к пространственно-неоднородным задачам.

Нас же будут интересовать методы для системы уравнений типа Смолуховского, требующие минимальной априорной информации о структуре решения, и применимые в широком диапазоне параметров задачи с минимальными изменениями; и хотя большинство предлагаемых методов всё же будут использовать в своей работе некоторую специфическую структуру решения, во всех случаях она обнаруживается методами адаптивно и не требует априорной информации, а сами методы существенно зависят от неё для достижения численной эффективности, но не точности приближения.

Опорным результатом, на котором будет строиться большая часть предлагаемых методов, является полученный в работе[11] быстрый алгоритм вычисления правой части в системе уравнений Смолуховского, достигающий на широком классе практически значимых параметров сложности $O(N \log N)$ — существенное улучшение по сравнению с $O(N^2)$ «наивного» алгоритма, достигнутое без необходимости строить дополнительные предположения об устройстве самого решения.

## Цели и задачи

Основной целью работы является построение эффективных численных методов для связанных с уравнением Смолуховского моделей, использующих структуру возникающих в задаче

[11] Matveev S. A., Smirnov A. P., Tyrtyshnikov E. E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // Journal of Computational Physics. — 2015. — Vol. 282. — P. 23–32.

матриц — как связанных с постановкой задачи, так и возникающих в процессе решения — но, в случаях, когда наличие такой структуры проблематично доказать заранее для достаточно широкого класса постановок, свободных от априорных предположений о её наличии и обнаруживающих её самостоятельно в процессе решения.

Основных интересующих нас задач, связанных с уравнениями Смолуховского, будет три:

1. поиск полного решения исходной системы дифференциальных уравнений как функции времени;

2. поиск стационарного решения задачи, являющегося в большинстве случаев асимптотой для полного решения;

3. и решение пространственно-неоднородной задачи, в которой агрегация сочетается с дополнительными пространственными эффектами — в нашем случае, переносом.

Порядок изложения, впрочем, соответствует хронологическому порядку работы над соответствующими методами и развитию используемых в них идей, и не следует строго логическому порядку рассмотрения постановок.

**Объектом исследования** являются системы слипающихся частиц и описывающие их уравнения типа Смолуховского. **Предметом исследования** являются численные методы решения связанных с уравнениями типа Смолуховского задач.

## Научная новизна

В работе предложены два различных варианта реализации метода Ньютона для поиска стационарного решения, разнящиеся в области применения однако демонстрирующие существенное ускорение построения решения по сравнению с ранее применявшимися методами. Для построения решения по времени показана возможность продуктивного использования методов редукции модели, включая метод поиска базиса в задачах с циклическими решениями с автоматическим обнаружением цикла. Для пространственно-неоднородной задачи предложен приближенный метод на основе редукции модели, не требующий априорных сведений об устройстве решения и позволяющий получать решения с приемлемой точностью заметно быстрее, чем при полном решении методом конечных разностей. При построении методов также получены некоторые вспомогательные теоретические результаты, являющиеся сами по себе новыми, однако представляющие интерес главным образом в контексте строящихся на их основе методов.

## Теоретическая и практическая значимость

Практическая значимость работы состоит в возможности применения разработанных численных методов для решения задач, связанных с уравнениями Смолуховского, в отдельных случаях в сотни раз быстрее, чем существующими методами.

С теоретической точки зрения работа содержит ряд наблюдений, связанных со структурой уравнений Смолуховского, как например исследование структуры матрицы Якоби оператора правой части и оценки на ранги её составляющих или оценки на TT-ранги оператора, а также эмпирические по своей природе но всё же представляющие общий теоретический интерес наблюдения, такие как существование маломерного линейного пространства, содержащего в себе решение на всём временном интервале или на части пространственной области, а также возможность переноса первого между задачами разной размерности, вкупе формирующих потенциальную основу для дальнейших теоретических исследований рассматриваемой модели.

## Методы исследования

При получении основных результатов диссертации использовались методы численной линейной алгебры.

## Положения, выносимые на защиту

- Эффективная реализация метода Ньютона-Крылова для поиска стационарного решения системы обыкновенных дифференциальных уравнений Смолуховского, включая
  - обобщение алгоритма быстрого вычисления квадратичного оператора[12] на билинейный, и связанный с этим алгоритм быстрого вычисления произведения матрицы Якоби оператора агрегации на вектор,
  - построенный для матрицы Якоби предобусловливатель, и
  - программную реализацию построенного метода, с помощью которой эффективность метода была проверена на численных экспериментах;
- Реализация метода Ньютона для той же задачи на основе тензорных разложений, включая
  - явный вид TT-разложения «скелета» оператора агрегации, и

[12]Matveev S. A., Smirnov A. P., Tyrtyshnikov E. E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // Journal of Computational Physics. — 2015. — Vol. 282. — P. 23–32.

  - программную реализацию метода, с помощью которой была проверена работоспособность и эффективность метода в отдельных случаях;

- Проверка применимости редукции модели к решению системы ОДУ типа Смолуховского, включая

  - алгоритм построения базиса редукции с автоматическим обнаружением циклов в решении,
  - программную реализацию указанного алгоритма в сочетании с редуцированной формой системы, с помощью которой проверена возможность сокращения вычислительных затрат по сравнению с известными алгоритмами, и
  - эмпирическое наблюдение о связи базисов редукции в системах разного размера;

- Численный метод моделирования агрегации с переносом на основе редукции по пространству, включая

  - метод пересчёта решения на одном шаге по времени с контролируемой погрешностью, и
  - программная реализация, на которой проверена эффективность предлагаемого метода.

## Апробация результатов

Результаты, представленные в работе, докладывались на научном семинаре в ИВМ РАН, а также на 6 конференциях

1. «Ломоносовские чтения 2018»
2. «12th International Conference on Large-Scale Scientific Computations (LSSC'19)»
3. «Ломоносовские чтения 2020»
4. «The 5th International Conference on Matrix Methods in Mathematics and applications»
5. «Ломоносовские чтения 2021»
6. Международная конференция «Matrix Equations and Tensor Techniques IX (METTIX)»

### Достоверность

Работоспособность и эффективность представленных алгоритмов демонстрируется в численных экспериментах. Достоверность экспериментальных результатов обеспечивается сверкой результатов с результатами работы известных ранее алгоритмов, а также в части алгоритмов возможностью прямого контроля точности вычислений.

### Публикации

Основные результаты работы представлены в четырёх публикациях [1–4], все в изданиях, индексируемых в Scopus, из которых три [1,3,4] в журналах, индексируемых в Web of Science Core Collection, одна [3] в журнале, индексируемом в РИНЦ, и одна [4] в журнале из перечня ВАК.

### Личный вклад автора

В работе [1] автору принадлежат быстрый алгоритм вычисления произведения матрицы Якоби на вектор, конструкция предобусловливателя и лемма о единственном решении конечной однородной задачи, а также программная реализация описанного метода.

В работе [2] автором построено TTT-разложение для «скелета» оператора агрегации, и реализован полученный метод.

В работе [3] автором получен редуцированный вид уравнения Смолуховского и построен и реализован метод построения базиса редукции для частного класса ядер агрегации.

В работе [4] автором построен и реализован описанный алгоритм численного решения уравнения Смолуховского с переносом на основе редукции по пространству.

### Структура работы

Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Общий объём работы составляет 108 страниц, включая 14 рисунков, 7 таблиц и список литературы из 53 наименований.

## 1. Благодарности

Автор выражает благодарность академику РАН Тыртышникову Евгению Евгеньевичу за научное руководство и поддержку в исследованиях, доценту факультета ВМК МГУ Матвееву

Сергею Александровичу и доценту факультета ВМК МГУ Смирнову Александру Павловичу за неоценимую помощь и плодотворное сотрудничество, старшему научному сотруднику ИВМ РАН Замарашкину Николаю Леонидовичу и младшему научному сотруднику ИВМ РАН Желткову Дмитрию Александровичу за ценные замечания и обсуждение.

# Содержание работы

Во введении — первой главе — обосновывается актуальность темы диссертации и описывается её общая структура.

Во второй главе приводится используемая в работе известная в литературе[13][14] постановка задачи агрегации:

$$\frac{dn_k}{dt} = J_k + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{k-1} C_{i\,k-i} n_i n_{k-i} + \frac{\lambda\,[k=1]}{2}\sum_{i,j=1}^{N}(i+j)C_{ij}n_i n_j - (1+\lambda)n_k\sum_{i=1}^{N} C_{ki}n_i, \tag{1}$$

где

$n_k(t)$ — неотрицательные концентрации частиц массы $k$ в момент времени $t$;

$C_{i\,j}$ — симметричная неотрицательная матрица «ядра» агрегации;

$\lambda$ — коэффициент, определяющий относительную вероятность деструктивных столкновений.

Для упрощения записи и некоторых последующих выкладок предлагается сокращённое обозначение

$$\frac{dn}{dt} = \mathcal{J} + \mathcal{S}(n) = \mathcal{J} + \mathcal{S}(n,n), \tag{2}$$

где $\mathcal{S}$ — квадратичный или билинейный оператор, объединяющий вся зависящие от $n$ слагаемые в правой части (1).

Также во второй главе приводится используемый в работе быстрый алгоритм вычисления $\mathcal{S}(n)$ при условии ограниченности ранга ядра $C_{ij}$ на основе быстрых алгоритмов для свёрток с общей сложностью $O(N\log N)$ из[15], а также его обобщение на билинейный оператор $\mathcal{S}(x,y)$.

[13]Size distribution of particles in Saturn's rings from aggregation and fragmentation / Brilliantov N. V., Krapivsky P. L., Bodrova A., Spahn F., Hayakawa H., Stadnichuk V., and Schmidt J. // PNAS. — 2015. — Vol. 112, no. 31. — P. 9536–9541.

[14]Anderson acceleration method of finding steady-state particle size distribution for a wide class of aggregation–fragmentation models / Matveev S. A., Stadnichuk V. I., Tyrtyshnikov E. E., Smirnov A. P., Ampilogova N. V., and Brilliantov N. V. // Computer Physics Communications. — 2018. — Vol. 224. — P. 154–163.

[15]Matveev S. A., Smirnov A. P., Tyrtyshnikov E. E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // Journal of Computational Physics. — 2015. — Vol. 282. — P. 23–32.

Третья глава посвящена алгоритму Ньютона-Крылова для поиска стационарного решения системы (1). Для эффективной реализации метода Ньютона-Крылова, необходимо несколько компонентов:

1. быстрый алгоритм вычисления произведения матрицы Якоби на вектор;

2. эффективный предобусловливатель для решения системы с матрицей Якоби;

3. в качестве необязательного дополнения — величина шага.

Первая проблема решается с учётом описанного ранее метода вычисления билинейного оператора, поскольку $(d\mathcal{S}(n)/dn)\nu = 2\mathcal{S}(n,\nu)$.

Второй вопрос предлагается решать, опираясь на явное представление матрицы Якоби в виде суммы

$$J(n) = L + M, \tag{3}$$

$$L_{k\,l} = -(1+\lambda)\,[k=l]\sum_{i=1}^{N} C_{k\,i}n_i + [l<k]\,C_{k-l\,l}n_{k-l}, \tag{4}$$

$$M_{k\,l} = \lambda\,[k=1]\sum_{i=1}^{N}(i+l)C_{i\,l}n_i - (1+\lambda)n_k C_{k\,l}. \tag{5}$$

Здесь $L$ — нижняя треугольная матрица, а $M$ — матрица малого ранга; точнее, если ранг $C$ равен $R$, ранг $M$ не превышает $R$+2. Более того, поскольку в известных аналитических решениях $C_{k-l\,l}n_{k-l}$ убывает с ростом $k$, есть основания полагать, что внедиагональные элементы $L$ будут, как правило, убывать при удалении от диагонали. Отсюда естественным образом получается предобусловливатель в виде суммы $M$ и ленточной нижнетреугольной матрицы с элементами из $L$. Если берётся $p$ диагоналей в ленточной матрице, сложность решения системы с таким предобусловливателем составляет $O(NpR)$.

Наконец, оптимальный в смысле второй нормы $\mathcal{S}(n)$ шаг выбирается аналитически, так как, поскольку оператор квадратичный, норма результата вдоль прямой представляет собой многочлен четвёртой степени; в тексте показано, как найти все его коэффициенты вычислив оператор всего в одной дополнительной точке.

Приведены численные эксперименты с построенным методом с ядром $C_{i\,j} = (i/j)^a + (j/i)^a$, результаты которых приведены на рис. 1 и 2.

В четвёртой главе рассматривается альтернативный подход к решению той же проблемы, основанный на идее тензоризации и тензорных разложений[16][17]. А именно, решение ищется в

[16]Oseledets I. V. Tensor-Train Decomposition // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2011. — Vol. 33, no. 5. — P. 2295–2317.

[17]Oseledets I. V. Approximation of $2^d \times 2^d$ matrices using tensor decomposition // SIAM Journal on Matrix Analysis

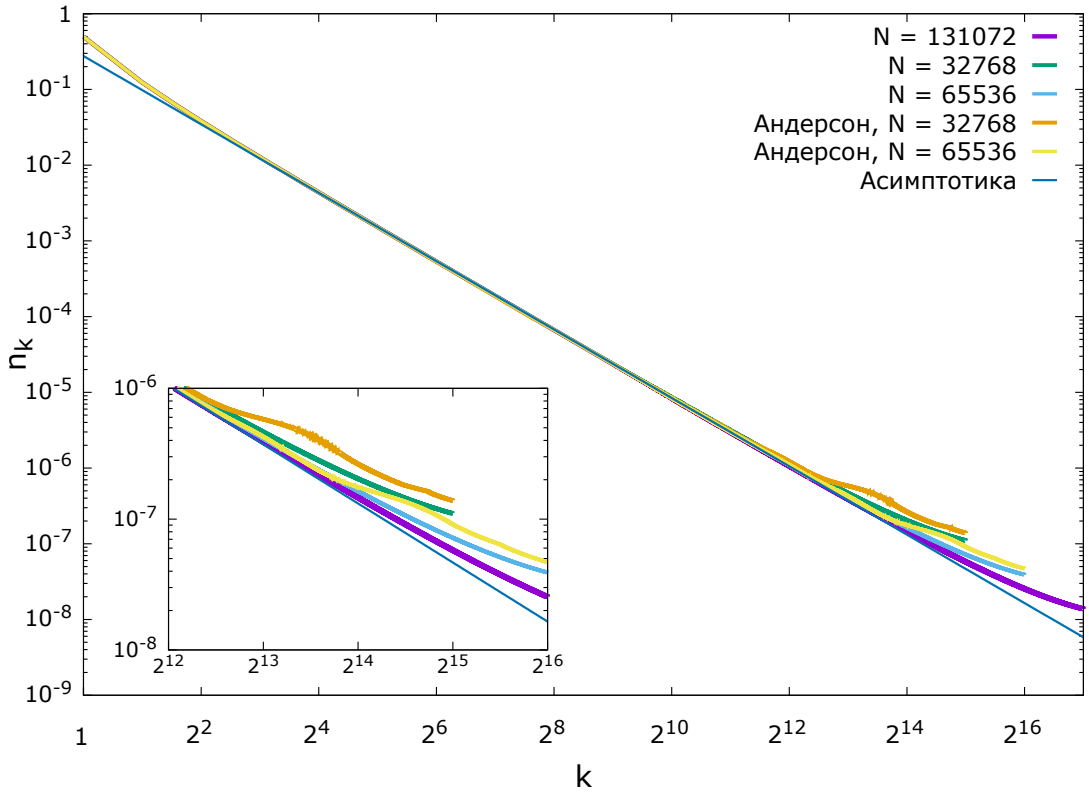


Рис. 1: График стационарных решений, полученных методами Ньютона и Андерсона, при разных размерах задачи $N$.

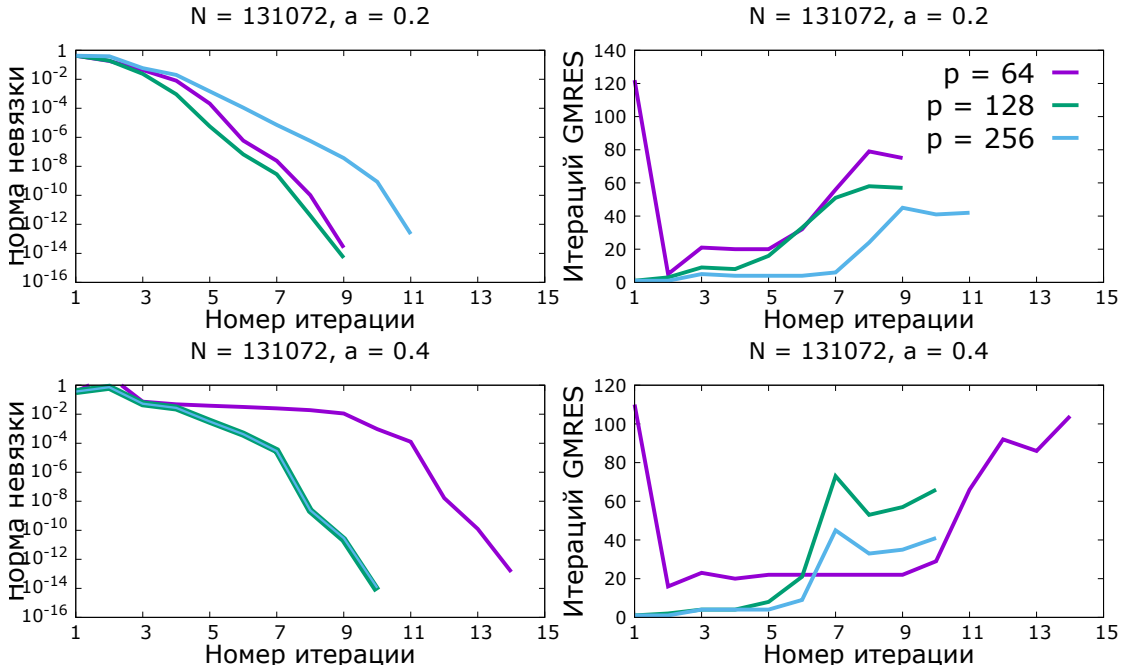


Рис. 2: Сходимость метода. С левой стороны для $a = 0.2$ и $a = 0.4$ представлена норма общей невязки $\|J + \mathcal{S}(n)\|_2$; справа показано число итераций GMRES при решении системы с матрицей Якоби

виде тензорного поезда

$$\tilde{n}(i_1, i_2, \ldots, i_d) = \sum_{\alpha_1=1}^{r_1} \cdots \sum_{\alpha_d=1}^{r_d} \tilde{n}_1(i_1, \alpha_1)\tilde{n}_2(\alpha_1, i_2, \alpha_2) \cdots \tilde{n}_{d-1}(\alpha_{d-2}, i_{d-1}, \alpha_{d-1})\tilde{n}_d(\alpha_{d-1}, i_d), \tag{6}$$

или, сокращённо,

$$\tilde{n}(i_1, i_2, \ldots, i_d) = \tilde{n}_1(i_1)\tilde{n}_2(i_2) \cdots \tilde{n}_{d-1}(i_{d-1})\tilde{n}_d(i_d), \tag{7}$$

где

$$\tilde{n}(i_1, i_2, \ldots, i_d) = n_{\overline{i_1 i_2 \ldots i_d}}, \tag{8}$$

а

$$\overline{i_1 i_2 \ldots i_d} = i_1 + (i_2 - 1) \times p_1 + (i_3 - 1) \times p_1 p_2 + \ldots + (i_d - 1) \times \prod_{j=1}^{d-1} p_j, \tag{9}$$

где $N = p_1 p_2 \cdots p_d$. Числа $r_s$ являются параметрами представления; их минимальные значения называются TT-рангами тензора.

Аналогичное представление строится и для оператора $\mathcal{S}$, трёхмерный тензор которого

$$\mathcal{S}(x, y)_k = \sum_{i,j=1}^{n} S_{i,j,k} x_i y_j \tag{10}$$

преобразуется в $d$-мерный следующим образом:

$$\tilde{S}(\overline{i_1 j_1 k_1}, \overline{i_2 j_2 k_2}, \ldots, \overline{i_d j_d k_d}) = S_{\overline{i_1 i_2 \ldots i_d}, \overline{j_1 j_2 \ldots j_d}, \overline{k_1 k_2 \ldots k_d}}. \tag{11}$$

В главе приводятся основные сведения по работе с тензорными поездами — главным образом, операции с представленными в таком формате тензорами.

Для работы с тензором оператора агрегации удобно прежде всего разделить специфическую для задачи часть — ядро $C_{i\,j}$ — и общую структуру тензора, благо в данном случае это делается особенно просто:

$$S_{i\,j\,k} = \frac{1}{2} C_{i\,j} T_{i\,j\,k}, \tag{12}$$

а тензор $T$ в свою очередь удобно представить в виде суммы тензоров

$$T = A^{(1)} + \lambda A^{(2)} - (1 + \lambda) A^{(3)} - (1 + \lambda) A^{(4)}, \tag{13a}$$

$$A^{(1)}(i, j, k) = [i + j = k], \tag{13b}$$

$$A^{(2)}(i, j, k) = (i + j)\,[k = 1], \tag{13c}$$

$$A^{(3)}(i, j, k) = [i = k], \tag{13d}$$

$$A^{(4)}(i, j, k) = [j = k]; \tag{13e}$$

and Applications. — 2010. — Vol. 31, no. 4. — P. 2130–2145.

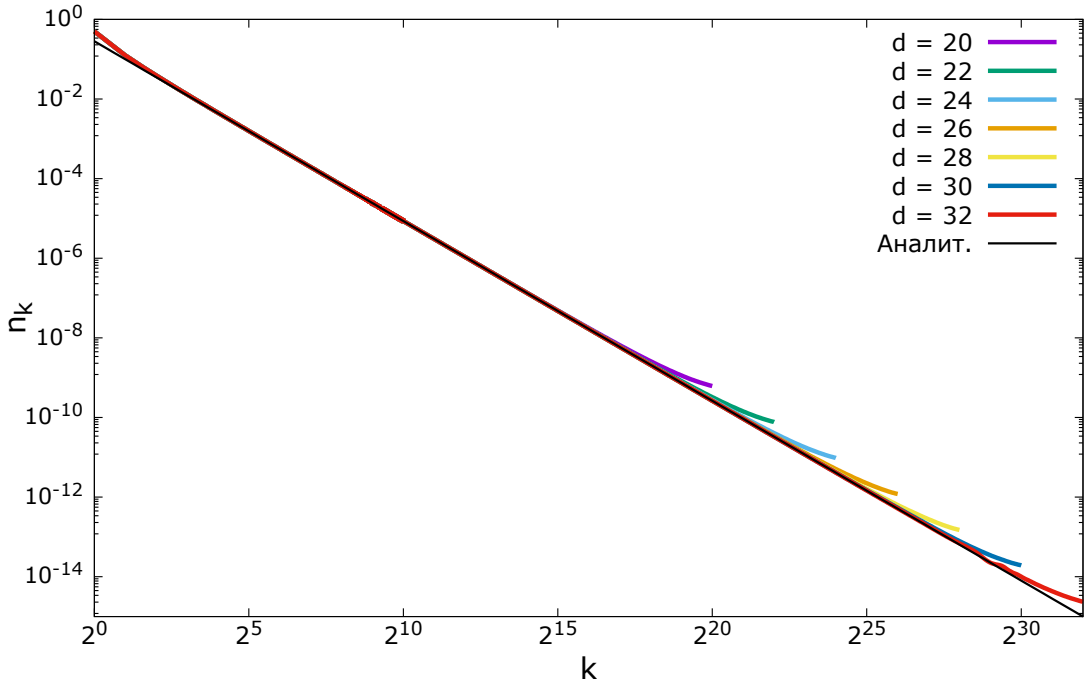


Рис. 3: Сравнение численного и аналитического решения задачи с постоянным ядром и $N = 2^d$.

Тензоры $A^{(3)}$ и $A^{(4)}$ имеют TT-ранги равные 1, а $A^{(2)}$ — 2. Для тензора $A^{(1)}$ получено явное разложение в тензорный поезд:

$$\hat{A}_1^{(1)}(i_1, j_1, k_1) = \begin{pmatrix} [i_1 + j_1 - k_1 = 0] & [i_1 + j_1 - k_1 = p_1] \end{pmatrix}. \tag{14a}$$

$$\hat{A}_s^{(1)}(i_s, j_s, k_s) = \begin{pmatrix} [i_s + j_s - k_s = 1] & [i_s + j_s - k_s = p_s + 1] \\ [i_s + j_s - k_s = 0] & [i_s + j_s - k_s = p_s] \end{pmatrix}, s \neq 1, d, \tag{14b}$$

$$\hat{A}_d^{(1)}(i_d, j_d, k_d) = \begin{pmatrix} [i_d + j_d - k_d = 1] \\ [i_d + j_d - k_d = 0] \end{pmatrix}, \tag{14c}$$

где $1 \leq i_s, j_s, k_s \leq p_s$. Окончательно, пользуясь свойствами TT-разложения, TT-ранги $S$ не превосходят TT-рангов $C$ умноженных на 4 в задаче без фрагментации или на 6 в задаче с ней.

Также в главе приводятся результаты численных экспериментов с методом Ньютона, реализованным в терминах TT-разложения — для вычисления матрицы Якоби и квадратичного оператора используется операция свёртки тензоров, а для решения линейных систем используется метод AMEN[18]. Для систем с постоянным ядром (TT-ранги равны 1) решение удаётся найти достаточно быстро даже для очень больших $N$; результат представлен на рис. 3. У более сложных ядер, к сожалению, ранги оказываются выше (хотя и ограничены), что приводит к существенно худшей точности решения (см. рис. 4).

[18]Dolgov S. V., Savostyanov D. V. Alternating Minimal Energy Methods for Linear Systems in Higher Dimensions // SIAM Journal on Scientific Computing. — 2014. — Vol. 36, no. 5. — P. A2248–A2271.

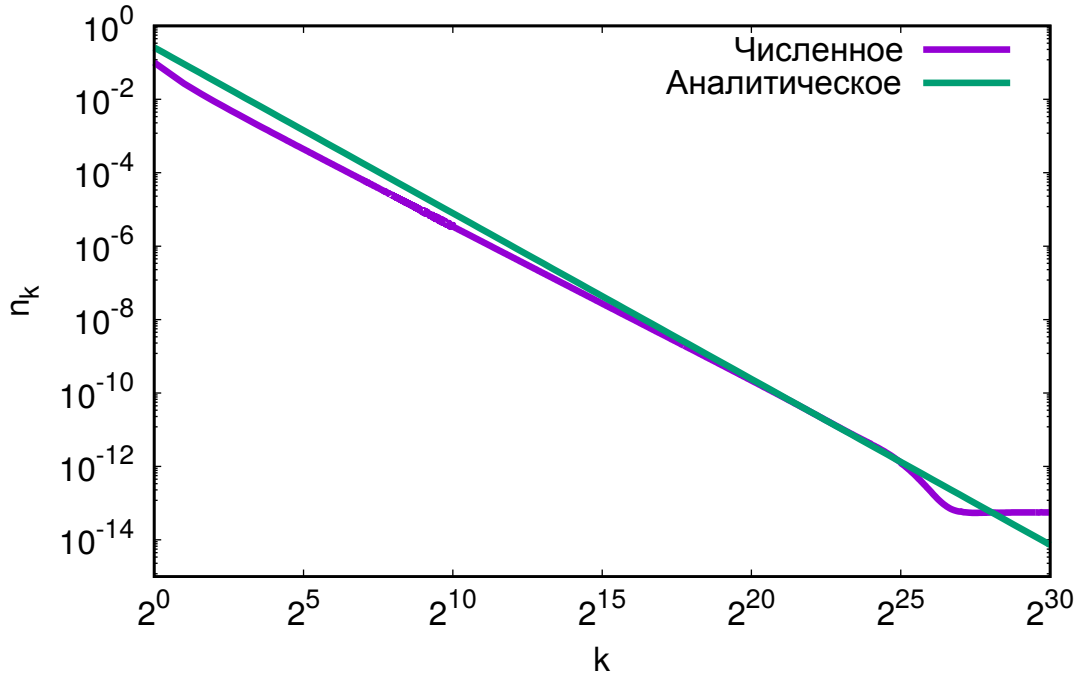


Рис. 4: Сравнение численного и аналитического решений для ядра с $a = 0.2$ и $N = 2^{30}$; численное решение округлено до TT-рангов не более 5.

В пятой главе приводятся предварительные результаты по применению редукции модели к исходной системе дифференциальных уравнений. Из вида уравнения сразу следует возможность построения редуцированной системы, полностью независимой от размера исходной системы $N$:

$$\frac{d}{dt}x_\alpha \approx \sum_{k=1}^{N} V_{k\,\alpha} J_k + \sum_{\beta,\gamma=1}^{r} \left( \sum_{i,j,k=1}^{N} S_{i\,j\,k} V_{i\,\alpha} V_{j\,\beta} V_{k\,\gamma} \right) x_\beta x_\gamma, \tag{15}$$

где $n(t) \approx VV^T n(t)$, а $x(t) = V^T n(t)$; иными словами, столбцы $V$ образуют ортонормированный базис подпространства, приближенно содержащего решение $n(t)$ во все моменты времени.

Вопрос поиска такого подпространства в общем случае остаётся открытым, однако можно рассмотреть частный случай уравнений с циклическими решениями[19][20]; в этом случае базис заведомо определяется некоторым начальным отрезком решения, позволяя использовать редуцированное уравнение для расчёта дальнейшего поведения системы. При этом, конечно, правомерность такого расчёта зависит в значительной степени от точности аппроксимации оставшейся части решения в полученном базисе.

В этой связи предлагается простой «жадный» алгоритм 1 построения базиса, основанный на

[19]Периодические режимы в конденсирующейся аэродисперсной системе с источником / Загайнов В. А., Лушников А. А., Бахтырева М. С., Луценко А. О. и Ходжер Т. В. // Доклады Академии Наук. — 2007. — Т. 414, № 1. — С. 93–96.

[20]Oscillations in aggregation-shattering processes / Matveev S. A., Krapivsky P. L., Smirnov A. P., Tyrtyshnikov E. E., and Brilliantov N. V. // Phys. Rev. Lett. — 2017. — Vol. 119, no. 26. — P. 260601.

методе снимков[21].

**Алгоритм 1** Общая схема используемого алгоритма построения базиса редукции.

**Require:** «Ширина» для «окон» $\tau > 0$, параметры точности $\varepsilon' > \varepsilon > 0$, $\delta > 0$

**Ensure:** $V$ — искомый базис.

$V \leftarrow 0 \in \mathbb{R}^{N \times 0}$

$k \leftarrow 0$

**repeat**

Решить исходную систему (1) полностью на интервале $[k\tau, (k+1)\tau]$ любым способом.

$\hat{V} \leftarrow$ базис POD для $n(t)$ на $[k\tau, (k+1)\tau]$

$\Delta \leftarrow \|(I - VV^T)\hat{V}\|_2$

**if** $\Delta > \varepsilon'$ **then**

$U\Sigma W^T \leftarrow (V \mid \hat{V})$ {сингулярное разложение с сингулярными числами $\sigma_i$}

Найти $i \colon \sigma_i > \delta, \sigma_{i+1} \leq \delta$

$V \leftarrow$ первые $i$ столбцов $U$

**end if**

$k \leftarrow k + 1$

**until** $\Delta \leq \varepsilon$

Правомерность такой экстраполяции проверена в частных случаях в численных экспериментах; на рис. 5 приведены графики ошибки редуцированного решения в сравнении с полным в нескольких из них. Переход с интерполяции на экстраполяцию отмечается резким ростом ошибки, но она, тем не менее, остаётся в разумных границах (порядка $10^{-3}$) и даже падает со временем.

Наконец, в шестой главе обсуждается возможность применения редукции по пространству в уравнении агрегации с переносом:

$$\frac{\partial n_k}{\partial t} + v_k \frac{\partial n_k}{\partial x} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{i\,j} n_i n_j - n_k \sum_{i=1}^{K} C_{k\,j} n_j, \qquad x \geq 0, t > 0 \tag{16a}$$

$$n_k(x = 0, t) = \phi_k(t) \tag{16b}$$

$$n_k(x, t = 0) = \psi_k(x) \tag{16c}$$

$$\phi_k(0) = \psi_k(0) \tag{16d}$$

[21] Pinnau R. Model Reduction via Proper Orthogonal Decomposition // Model Order Reduction: Theory, Research Aspects and Applications. Mathematics in Industry / ed. by A. Schilders W. H., van der Vorst H. A., J. Rommes. — Springer, Berlin, Heidelberg, 2008. — Vol. 13.

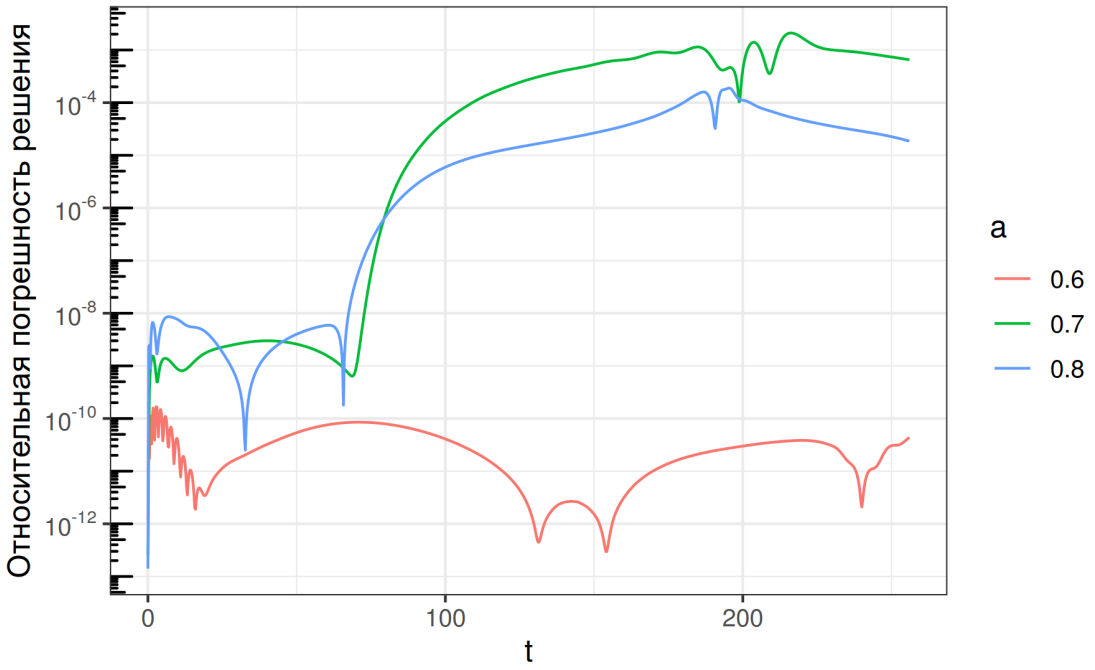


Рис. 5: Зависимость относительной погрешности решения во второй норме от времени для $N = 32768$. На вертикальной оси отложены значения $\|n(t) - \tilde{n}(t)\|_2 / \|n(t)\|_2$, где $\tilde{n}(t) = V\tilde{x}(t)$.

В данном случае предлагается искать базис на каждом шаге по времени отдельно, то есть строить для $n(x,t)$ в виде

$$n(x, t_k) \approx P_k q_k(x), \qquad q_k(x) \in \mathbb{R}^{R_k}, \quad P_k \in \mathbb{R}^{N \times R_k}.$$

В главе предлагается метод пересчёта базиса и коэффициентов разложения между шагами по времени; слагаемое, отвечающее за перенос, пересчитывается с помощью матричного крестового метода[22], а для расчёта агрегации с использованием билинейности получается явная формула. При этом ошибка аппроксимации на каждом шаге контролируема; общая погрешность при этом может, вообще говоря, расти экспоненциально, но численные эксперименты показывают приемлемые результаты (см. рис. 6).

[22]Горейнов С. А., Тыртышников Е. Е., Замарашкин Н. Л. Псевдоскелетные аппроксимации матриц // Доклады РАН. — 1995. — Т. 343, № 2. — С. 151–152.

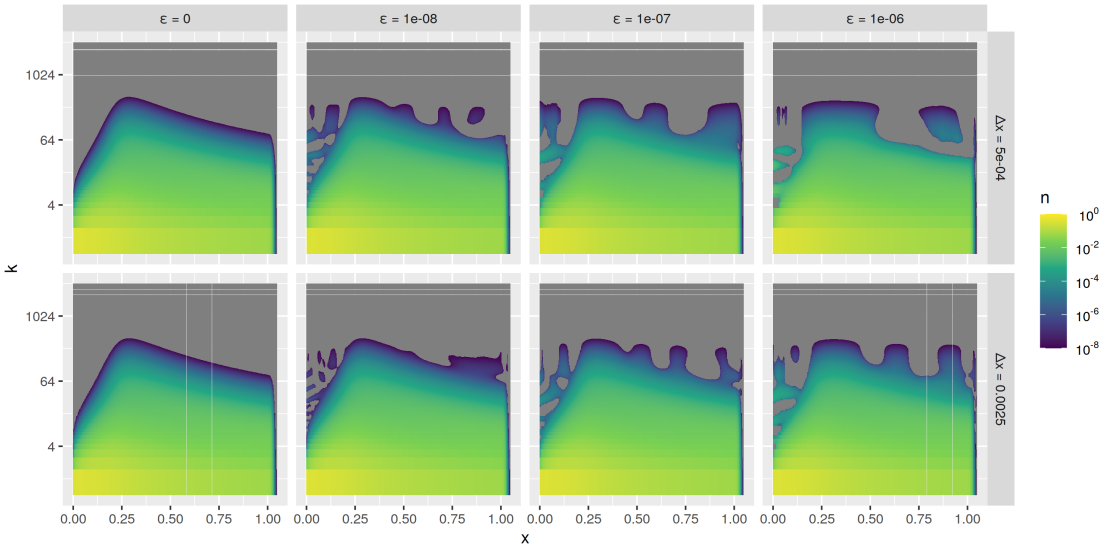


Рис. 6: Снимки решения в момент времени $t = 5$. $\varepsilon = 0$ соответствует исходной схеме без использования малоранговых аппроксимаций.

# Публикации по теме диссертации

## Публикации в изданиях, индексируемых в базах Scopus, WoS, RSCI

1. Newton method for stationary and quasi-stationary problems for Smoluchowski-type equations / I. V. Timokhin, S. A. Matveev, N. Siddharth et al. // Journal of Computational Physics. — 2019. — Vol. 382. — P. 124–137. *Scopus, WoS; WoS IF=3.553*

2. I. Timokhin. Tensorisation in the solution of smoluchowski type equations // Large-Scale Scientific Computing. — Vol. 11958 of Theoretical Computer Science and General Issues, subseries of Lecture Notes in Computer Science. — Springer International Publishing, 2020. — P. 181–188. *Scopus; Scopus SNIP=0.628*

3. МЕТОД ПОИСКА РЕДУЦИРОВАННОГО БАЗИСА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ / И. В. Тимохин, С. А. Матвеев, Е. Е. Тыртышников, А. П. Смирнов // Доклады Российской академии наук. Математика, информатика, процессы управления. — 2021. — Т. 497, № 2_21. — С. 35–38. *RSCI* (Method for reduced basis discovery in nonstationary problems / I. V. Timokhin, S. A. Matveev, E. E. Tyrtyshnikov, A. P. Smirnov // Doklady Mathematics. — 2021. — Vol. 103. — P. 92–94. *Scopus, WoS; WoS IF=0.619*)

4. Model reduction for Smoluchowski equations with particle transfer / I. Timokhin, S. Matveev, E. Tyrtyshnikov, A. Smirnov // Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. — 2021. — Vol. 36, no. 3. — P. 177–181. *Scopus, WoS; WoS IF=1.161*