

УДК 519.622.2

## МЕТОД ПОИСКА РЕДУЦИРОВАННОГО БАЗИСА ДЛЯ НЕСТАЦИОНАРНЫХ ЗАДАЧ

© 2021 г. И. В. Тимохин<sup>1,2,\*</sup>, С. А. Матвеев<sup>1,2</sup>,  
академик РАН Е. Е. Тыртышников<sup>1,2</sup>, А. П. Смирнов<sup>1</sup>

Поступило 16.02.2021 г.

После доработки 16.02.2021 г.

Принято к публикации 24.02.2021 г.

Методы редукции модели позволяют заметно сократить вычислительные затраты при решении больших систем дифференциальных уравнений при помощи перехода к расчетам для специального пространства малой размерности. Эти методы требуют априорной информации о базисе такого маломерного пространства, которую возможно получить лишь при численном решении исходной системы высокой размерности. Основное наблюдение данной работы состоит в том, что на широком классе экспериментально рассмотренных задач агрегационной кинетики базис малой размерности существует, следовательно, редукция возможна. В данной работе мы предлагаем новый и эффективный алгоритм построения искомого базиса редуцированной модели без проведения полного расчета. Предложенный алгоритм позволяет существенно выиграть от использования методов редукции модели даже при решении единичной системы без существенной априорной информации о ней.

*Ключевые слова:* уравнение Смолуховского, редукция модели, метод снимков

DOI: 10.31857/S2686954321020065

### 1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Мы будем рассматривать метод редукции модели применительно к общего вида системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{df}{dt} = F(f(t), t), \quad f(t) \in \mathbb{R}^N. \quad (1)$$

Идея метода в такой ситуации состоит в том, чтобы найти подпространство  $V \subset \mathbb{R}^N$  размерности существенно меньшей  $N$ , на котором хорошо приближается  $f(t)$ , и построить по (1) систему на координаты такого приближения; при этом численная сложность решения такой системы может оказаться заметно меньше сложности решения полной системы. Построение такого пространства в общем случае требует некоторой априорной информации о решении, что затрудняет использование метода для единичных систем.

В данной работе мы предложим прямолинейный алгоритм построения такого подпростран-

ства на основе метода POD [4] по ходу решения исходной системы, с автоматическим критерием завершения построения. При этом мы будем предполагать дополнительно, что  $f(t)$  (приближенно) пробегает искомое пространство за некоторый начальный временной интервал  $t \in [0; T_H]$ , меньший интересующего нас (например, решение циклично начиная с некоторого момента)  $t \in [0; T_H]$ ,  $T_H < T_H$ . Работоспособность метода будет продемонстрирована на примере уравнения Смолуховского.

### 2. ОПИСАНИЕ АЛГОРИТМА

Разобьем весь временной интервал на окна фиксированной длины и будем решать (обычным методом в  $N$ -мерном пространстве) систему (1) на каждом окне по очереди. Решив систему на очередном окне, с помощью классического метода снимков и POD, найдем базис, аппроксимирующий решение на этом окне. Сравним полученный базис с уже накопленным (изначально пустым); если накопленный базис приближает новый достаточно хорошо, процесс можно останавливать, искомым базис найден; если достаточно плохо, дополним накопленный базис новым и продолжим расчеты.

<sup>1</sup> Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>2</sup> Институт вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: m@ivan.timokhin.name

В качестве меры качества приближения нового базиса накопленным будем использовать норму проекции

$$\|(I - U_i U_i^*) V_i\|_2,$$

где  $V_i$  – базис текущего окна, а  $U_i$  – накопленный (все базисы предполагаются ортонормированными). За оценку качества приближения в алгоритме отвечают два параметра:  $\epsilon' > \epsilon > 0$ . Если это значение меньше  $\epsilon$ , процесс останавливается; если больше  $\epsilon'$  – базис расширяется; в противном случае процесс продолжается без расширения базиса; это важно для предотвращения переобучения на начальном отрезке решения. Подбор подходящего значения  $\epsilon'$ , таким образом, связан с необходимостью балансировки скорости построения базиса и опасности переобучения; в наших экспериментах мы использовали  $\epsilon' = 10^3 \epsilon$ .

Для дополнения базиса  $U_i$  новым базисом  $V_i$  прибегнем к сингулярному разложению. А именно, составим из векторов обоих базисов блочную матрицу  $A = (U_i | V_i)$  и возьмем в качестве нового базиса левые сингулярные векторы  $A$ , соответствующие сингулярным значениям, большим некоторого  $\delta > 0$ .

Полученный таким образом алгоритм идейно очень прост, но, как мы покажем далее на примере уравнения Смолуховского, вполне работоспособен.

### 3. КОНКРЕТНЫЙ ПРИМЕР НЕСТАЦИОНАРНОЙ СИСТЕМЫ

#### 3.1. Формулировка задачи

Мы рассматриваем модель пространственно-однородной системы частиц, эволюционирующей посредством слипания частиц с образованием более крупных. Базовой моделью агрегации частиц в таком случае является формально бесконечная система уравнений, предложенная Смолуховским [5]. В данной работе мы концентрируемся на модели агрегации частиц с источниками и стоком частиц массы большей  $N$ :

$$\frac{dn_k}{dt} = J_k + \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} C_{ij} n_i n_j - n_k \sum_{j=1}^N C_{jk} n_j, \quad (2)$$

$$k = 1, 2, \dots, N.$$

Здесь  $n_k$  – концентрация частиц массы  $k$ ,  $C_{ij}$  – ядро, характеризующее вероятность столкновения частиц размеров  $i$  и  $j$ ,  $J_k$  – мощность источников частиц размера  $k$ .

Время вычисления правой части непосредственно по формуле (2) составляет  $O(N^2)$ , что задает для решения прикладных задач с (2) непозволительно высокую нижнюю границу сложности. В [3, 6] для

отдельных ядер предложены алгоритмы сложности  $O(N \log N)$ , но для достаточно больших систем (а на практике существует необходимость решать системы с  $N$  до  $10^9$ ) желательно иметь возможность сократить вычислительные расходы дальше; нашей целью будет получить сжатое описание решения за время  $o(N)$ .

#### 3.2. Применение редукции

Покажем теперь, как, построив искомое подпространство, воспользоваться им для ускорения вычислений. Для этого соберем коэффициенты при квадратичных членах в (2) в тензор  $S \in \mathbb{R}^{N \times N \times N}$  с элементами

$$S_{ijk} = \frac{1}{2} (\delta_{i+j,k} - \delta_{i,k} - \delta_{j,k}) C_{ij},$$

где  $\delta_{i,j}$  – символ Кронекера, и запишем уравнение (2) в эквивалентной форме

$$\frac{dn_k}{dt} = J_k + \sum_{i,j=1}^N S_{ijk} n_i n_j. \quad (3)$$

Теперь, если нам известен искомый базис  $U$ , мы можем записать

$$n_k \approx \sum_{i=1}^R U_{ki} x_i$$

и преобразовать уравнение (3) в следующий вид:

$$\frac{dx_\alpha}{dt} \approx \hat{J}_\alpha + \sum_{\beta,\gamma} \hat{S}_{\alpha\beta\gamma} x_\beta x_\gamma,$$

$$\hat{S}_{\alpha\beta\gamma} = \sum_{i,j,k} S_{ijk} U_{i\alpha} U_{j\beta} U_{k\gamma}, \quad (4)$$

$$\hat{J}_\alpha = \sum_i U_{i\alpha} J_i.$$

Заменив в (4) приближенное равенство на точное, получим систему ОДУ на координаты разложения  $n_k$  по базису  $U$ .

Сложность вычисления правой части для (4) “в лоб”  $O(R^3)$ , что для достаточно малых  $R$  может оказаться лучше, чем  $O(N \log N)$ .

#### 3.3. Численные результаты

Численные эксперименты проводились с системой (2) со следующими значениями параметров:

$$N = 32768,$$

$$J_k = \delta_{k1},$$

$$C_{ij} = i^a j^{-a} + i^{-a} j^a,$$

с окнами размером  $\tau = 2$  и 65 снимками на каждом окне на интервале  $[0, 256]$ .

**Таблица 1.** Сравнение полного решения  $n(t)$  и редуцированного решения  $\tilde{n}(t)$  системы (2) для  $N = 32\,768$ , с различными значениями параметра ядра  $a$  и параметра точности  $\epsilon$  (здесь  $\epsilon' = 10^3 \epsilon$ ). Приведены время полного расчета на всем интервале  $t_{\Pi}$ , время расчета редуцированной системы на том же интервале  $t_p$ , размер полученного базиса  $R$ , момент времени  $T$ , на котором он был построен, и относительная погрешность редуцированного решения в конце интервала

$a$	$\epsilon$	$t_{\Pi}$ , с	$t_p$ , с	$R$	$T$	$\frac{\ n(T) - \tilde{n}(T)\ _2}{\ n(T)\ _2}$
0.55	$10^{-9}$	$4.8 \times 10^3$	75	49	56	$2.7 \times 10^{-3}$
0.55	$10^{-11}$	$4.8 \times 10^3$	$1.9 \times 10^3$	121	256	$9.0 \times 10^{-8}$
0.55	$10^{-13}$	$4.8 \times 10^3$	$4.5 \times 10^3$	330	256	$5.0 \times 10^{-10}$
0.65	$10^{-9}$	$4.8 \times 10^3$	83	51	62	$3.8 \times 10^{-2}$
0.65	$10^{-11}$	$4.8 \times 10^3$	$3.5 \times 10^3$	144	224	$2.8 \times 10^{-9}$
0.65	$10^{-13}$	$4.8 \times 10^3$	$4.5 \times 10^3$	345	250	$1.5 \times 10^{-9}$

Для этой системы в [1, 2, 7] было найдено циклическое поведение решения, начиная с некоторого момента времени при  $a > 1/2$ .

В табл. 1 представлено время построения полного решения  $t_{\Pi}$  и редуцированного  $t_p$ , а также размеры использовавшихся при этом базисов  $R$  и момент времени  $T$ , до которого строился базис. Как видно из табл. 1, размерность построенного подпространства, а значит и  $t_p = O(R^3)$ , существенно зависят от  $\epsilon$ , и при высокой точности может  $t_p$  даже превышать время построения полного решения. При близком к пограничному для образования циклов значению  $a$  для построения базиса с большой точностью потребовалось использовать весь интервал времени решения. Данное наблюдение можно считать весьма естественным, так как по мере приближения значения  $a$  к 0.5 быстро растет и период колебаний в системе. Остальные случаи показывают возможность получения приемлемого уровня точности даже с очень небольшим базисом, построенным по достаточно короткому начальному отрезку. Точность решения при этом зависит от  $\epsilon$  в основном опосредовано, через  $T$ , а потому не демонстрирует никакой простой зависимости.

Для решения всех систем дифференциальных уравнений использовался явный метод средней точки с шагом по времени  $2^{-12}$ ; правая часть в полной системе при этом вычислялась по методу, описанному в [3]. Все расчеты проводились на системе с процессором Intel Core i7-7700K, с использованием библиотеки Intel MKL.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для систем дифференциальных уравнений с циклическими решениями предложен эффективный алгоритм построения маломерного пространства для редукции модели по ходу численного решения исходной системы высокой размерности. Работоспособность нового алгоритма

проверена для важного класса задач кинетики агрегации с источником и стоком частиц, обладающих периодическими решениями по времени. Открытым для нас остается вопрос об эффективном построении такого пространства для систем без циклов, в которых искомое маломерное пространство, вообще говоря, восстанавливается только по полному решению.

### ИСТОЧНИК ФИНАНСИРОВАНИЯ

Данная работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект 19-11-00338).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Zagaynov V.A., Denisenko K., Moskaev A., Lushnikov A.A. Periodical regimes in source-enhanced coagulating systems with sinks // J. Aerosol Sci. 2001. V. 32. P. S983–S984.
2. Brilliantov N.V., Otienom W., Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E., Krapivsky P.L. Steady oscillations in aggregation-fragmentation processes // Phys. Rev. E. 2018. V. 98. № 1.
3. Matveev S.A., Smirnov A.P., Tyrtysnikov E.E. A fast numerical method for the Cauchy problem for the Smoluchowski equation // J. Comput. Phys. 2015. V. 282. № FEB. P. 23–32.
4. Pinnau R. Model Reduction via Proper Orthogonal Decomposition / In W.H.A. Schilders, H.A. van der Vorst, J. Rommes, ed. Model Order Reduction: Theory, Research Aspects and Applications. Mathematics in Industry. B.-Heidelberg: Springer, 2008, V. 13.
5. Smoluchowski M.V. Drei vortrage uber diffusion, Brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen // Zeitschrift fur Physik. 1916. V. 17. P. 557–585.
6. Timokhin I.V., Matveev S.A., Siddharth N., Tyrtysnikov E.E., Smirnov A.P., Brilliantov N.V. Newton method for stationary and quasi-stationary problems for Smoluchowski-type equations // J. Comput. Phys. 2019. V. 382. P. 124–137.
7. Ball R.C., Connaughton C., Jones P.P., Rajesh R., Zabornski O. Collective oscillations in irreversible coagulation driven by monomer inputs and large-cluster outputs // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 109. № 16. P. 168304.

## METHOD FOR REDUCED BASIS DISCOVERY IN NON-STATIONARY PROBLEMS

I. V. Timokhin<sup>a,b</sup>, S. A. Matveev<sup>a,b</sup>,

Academician of the RAS E. E. Tyrtyshnikov<sup>a,b</sup>, and A. P. Smirnov<sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Lomonosov Moscow State University, Moscow, Russian Federation*

<sup>b</sup> *Marchuk Institute of Numerical Mathematics of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation*

Model reduction methods allow in some cases to significantly decrease the time required to solve a large ODE system by performing all calculations in a vector space of significantly lower dimension than the original one. Unfortunately, these methods frequently require a priori information about the structure of the solution, possibly obtained by solving the same system for different values of parameters. We suggest a simple algorithm for constructing such a subspace while simultaneously solving the system, thus allowing one to benefit from model reduction even for a single system without significant a priori information, and demonstrate its effectiveness using the Smoluchowski equation as an example.

*Keywords:* Smoluchowski equation, model reduction, method of snapshots