

*Д. Лукашевич¹, Г. В. Овчинников², И. Ю. Тюкин³,
С. А. Матвеев⁴, Н. В. Бриллиантов⁵.*

МОДЕЛИРОВАНИЕ НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ КОАГУЛЯЦИИ*

Введение

Два подхода к моделированию кинетики агрегации на основе данных, описываемых уравнениями Смолуховского, проанализированы для бинарной и тройной коагуляции. Первый подход использует декомпозицию по динамическим модам (ДМД), а второй основан на искусственных нейронных сетях (ИНС). Мы получаем численное решение уравнений Смолуховского и сравниваем его с предсказаниями, полученными методами ДМД и ИНС. Для построения прогноза решения использовался начальный этап эволюции системы. Мы демонстрируем, что подход ДМД может точно предсказать распределение агрегатов по размерам до времени, в пять раз превышающего время обучения. Напротив, прямое применение ИНС не может обеспечить точный прогноз. Отсюда мы заключаем, что подход ДМД является эффективным инструментом для моделирования кинетики агрегации даже для сложных событий агрегации. В то же время применение ИНС требует их дальнейшей адаптации для исследуемой системы, возможно, путем внедрения физически-информированных ИНС и специально подобранных функций потерь.

Коагуляция повсеместно распространена в природе и широко используется в промышленности. Её можно наблюдать в самых разных масштабах времени и пространства, начиная от молекулярных структур

¹аспирант факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, e-mail: dmitri.luc@gmail.com.

²доцент ВШГА МГУ имени М. В. Ломоносова, e-mail: ovgeorge@yandex.ru

³профессор Королевского колледжа Лондона, e-mail: ivan.tyukin@kcl.ac.uk

⁴доцент факультета ВМК МГУ имени М. В. Ломоносова, e-mail: matseralex@cs.msu.ru.

⁵профессор Университета Лестера, e-mail: nb144@leicester.ac.uk

*С. А. Матвеев был поддержан проектом РНФ 19-11-00338 (раздел о динамическом разложении по модам), Д. Лукашевич, Г. В. Овчинников, и Н. В. Бриллиантов были поддержаны Аналитическим центром при правительстве РФ (соглашение 000000D730321P5Q0002, Грант Номер. 70-2021-00145 02.11.2021).

(например, эволюция эмульсий [1, 2], агрегации коллоидных частиц и белков [31,6] и т. д.) и переносимых по воздуху частиц (например, атмосферные процессы в облаках [3, 4]) до астрономических (например, эволюция галактик, межзвездных пылевых облаков и планетарных колец [32,34,33,36]). Основным математическим инструментом для количественного описания этих процессов остаются знаменитые уравнения Смолуховского, см., например, [5,6]. Эти уравнения пространственно-однородной коагуляции были получены более века назад [7]; они количественно определяют скорость попарной агрегации частиц. Недавно были предложены многочисленные обобщения уравнений Смолуховского для учета тройной агрегации, фрагментации частиц и их кинетической энергии для баллистической агрегации, например [6,33,35]. В то время как аналитические решения уравнений Смолуховского или обобщенных уравнений Смолуховского известны лишь для редких случаев [6,33,5], задача построения их численных решений остается очень сложной. Действительно, уравнения Смолуховского образуют бесконечный набор нелинейных ОДУ, поскольку с течением времени за счет слияния более мелких агрегатов возникают все более крупные агрегаты. Следовательно, по мере развития системы для адекватного моделирования требуется все больший и больший набор уравнений; для бесконечной эволюции систем требуется бесконечное число уравнений. Однако на практике можно иметь дело только с конечным набором. Отсюда возникает проблема, как количественно смоделировать бесконечную систему уравнений с помощью конечной (возможно, большой) системы. Более того, поскольку моделирование для большого набора уравнений требует больших вычислительных ресурсов, необходимо разработать эффективные и дешевые в вычислительном отношении методы.

Существует множество подходов, снижающих вычислительную сложность этой задачи. Одним из наиболее эффективных является метод, основанный на малоранговой аппроксимации ядер агрегации с последующим использованием сверток на основе быстрого преобразования Фурье (БПФ) [8, 9,36]. Некоторые методы используют редукцию модели путем поиска маломерного базиса для решения [10, 10]; этот подход также демонстрирует высокую эффективность. Был разработан ряд стохастических методов [12, 13, 14] и гибридных методов [15], см., например, недавний обзор [16]. Тем не менее остается главная проблема кинетики агрегации – аппроксимация бесконечного числа уравнений конечным набором. Задачу можно сформулировать следующим образом. Пусть $\mathcal{T}$ – максимальное время, в течение которого будет изучаться эволюция системы (т. е. нас не интересует, что происходит с системой по истечении времени $\mathcal{T}$). Тогда каким должно быть минимальное число уравнений $\mathcal{N}$, гарантирующее, что конечная система

уравнений описывает соответствующую бесконечную систему с приемлемой точностью? Однако может случиться так, что требуемое число $\mathcal{N} = \mathcal{N}(\mathcal{T})$ слишком велико для разумного времени вычислений. Следовательно, можно поставить вопрос: можно ли предсказать поведение большой системы в течение длительного времени, основываясь на моделировании гораздо меньшей системы? Цель настоящего исследования состоит в том, чтобы найти эффективный алгоритмический ответ на этот вопрос.

Для решения вышеуказанной проблемы мы предлагаем реализацию одного из двух методов: декомпозиция по динамическим модам (ДМД) и искусственные нейронные сети (ИНС). Оба метода зарекомендовали себя как эффективные инструменты для предсказания и аппроксимации решений. Первоначально ДМД был разработан как аналитический метод для уменьшения порядка модели [17, 18, 19]. Он описывает поведение целевой системы посредством линеаризации и реконструкции приближенного оператора Купмана [20]. Мы используем его как инструмент прогнозирования на основе данных, строя расширенное решение из некоторых начальных состояний. Можно также применить «правильную ортогональную декомпозицию» (Proper Orthogonal Decomposition или POD) [21] с помощью метода снимков, как альтернативный метод редукции модели для того же класса систем [11]. Недавний прогресс POD в решении уравнений Смолуховского [11,22] обосновывает нашу мотивацию протестировать метод ДМД в качестве более продвинутого подхода по сравнению с POD.

Первоначально ДМД был разработан как общий аналитический метод для редукции размерности модели [17, 18, 19]. Он описывает поведение целевой системы посредством линеаризации и реконструкции приближенного оператора Купмана [20]. Мы используем его как инструмент прогнозирования на основе данных, строя расширенное решение по совокупности начальных состояний. Можно также применить ортогональное разложение (POD) [21] методом снимков как альтернативный метод редукции модели для того же типа систем [10]. Недавний прогресс в применении POD для численного решения уравнений агрегации в пространственно-однородном и даже неоднородном случаях [10, 11] вызвал у нас интерес к тестированию ДМД для моделирования комбинированной бинарной и тройной кинетики агрегации как более нового подхода по сравнению с POD.

Искусственные нейронные сети (ИНС) широко используются в самых разных областях обработки и анализа данных, например [37,38,25,39], для прогнозирования природных процессов и временных рядов, т.е. [37,38,25,40]. Использование ИНС аналогично использованию ДМД или POD: общая структура ИНС состоит из метки времени в качестве входных данных и предсказания приближенного решения

изучаемой системы уравнений в качестве выходных данных. Обучение обеспечивается полученными снимками решения и позволяет построить приближенное решение.

Постановка задачи

Математическая модель кинетики агрегации соответствует системе кинетических уравнений, описывающих эволюцию концентраций c_k частиц размера k , состоящих из k элементарных звеньев - мономеров. Когда частица размера i встречается с частицей размера j , они образуют новый агрегат размера $i + j = k$. Таким образом, кинетические уравнения (уравнения Смолуховского) могут быть записаны в следующем виде

$$\frac{dc_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{ij} c_i c_j - c_k \sum_{j=1}^{\infty} K_{kj} c_j, \quad k = 1, 2, \dots, \infty \quad (1)$$

Коэффициенты K_{ij} в приведенных выше уравнениях представляют собой скорости процессов агрегации $[i] + [j] \rightarrow [i + j]$. Первый член в правой части уравнений. (1) количественно определяет процесс, при котором агрегаты размера k появляются из реакции агрегатов размера i и j , множитель $1/2$ препятствует повторному учету одного и того же события. Второй член – количественно определяет скорость, с которой концентрация кластеров размера k уменьшается из-за коалесценции с другими кластерами разных размеров. Уравнения (1) соответствуют классическим уравнениям Смолуховского, учитывающим только события бинарной коагуляции. В плотных системах также становится важной тройная коагуляция, когда три частицы встречаются, образуя совместный агрегат, т.е. [6,23].

В целях моделирования мы усекаем уравнения (1) и получаем конечную систему

$$\frac{dc_k}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{ij} c_i c_j - c_k \sum_{j=1}^N K_{kj} c_j, \quad k = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

Физически такое усечение равносильно включению стока частиц – все частицы размером более N исчезают из системы. Точно так же усеченная система для бинарных и тройных событий коагуляции выглядит следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{dc_k}{dt} = & \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{ij}^{(2)} c_i c_j - c_k \sum_{j=1}^N K_{kj}^{(2)} c_j + \\ & \frac{1}{6} \sum_{i+j+l=k} K_{ijl}^{(3)} c_i c_j c_l - \frac{c_k}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N K_{kij}^{(3)} c_i c_j, \quad k = 1, 2, \dots, N. \end{aligned} \quad (3)$$

Здесь коэффициенты $K_{ij}^{(2)}$ количественно определяют скорости бинарной коагуляции для частиц размера i и j , а $K_{ijl}^{(3)}$ – тройную коагуляцию частиц

размером i , j и l . Первый и второй члены в приведенных выше уравнениях (3) имеют то же значение, что и в уравнении (1). Третье слагаемое описывает скорость, с которой концентрация кластеров размера k увеличивается за счет событий вида $[i] + [j] + [l] \rightarrow [k]$. Четвертый член описывает скорость, с которой эта концентрация уменьшается во всех возможных тройных событиях коагуляции.

В нашем исследовании мы рассматриваем две частные тестовые задачи. Мы анализируем эффективность каждого подхода и сравниваем их. Первая задача соответствует конечной системе бинарных уравнений Смолуховского (2) с начальными условиями $c_k(0) = k^{-2.5}$. Второй набор входных данных соответствует уравнениям типа Смолуховского с тройной коагуляцией [6,24] и теми же начальными условиями:

$$\begin{aligned} \frac{dc_k}{dt} &= \frac{1}{2} \sum_{i+j=k} K_{ij}^{(2)} c_i c_j - c_k \sum_{j=1}^N K_{kj}^{(2)} c_j \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{i+j+l=k} K_{ijl}^{(3)} c_i c_j c_l - \frac{c_k}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N K_{kij}^{(3)} c_i c_j, \quad k = 1, 2, \dots, N \\ c_k(0) &= k^{-2.5} \\ K_{ij}^{(2)} &= \sqrt{i+j} \\ K_{ijl}^{(3)} &= \sqrt{i+j+l} \end{aligned} \quad (4)$$

Мы намеренно используем ядра коагуляции, имеющие нетривиальные малоранговые разложения, что усложняет детерминированные вычисления [9].

Динамическая модовая декомпозиция

Динамическая модовая декомпозиция (ДМД) – это алгоритм, предоставляющий набор базисных мод для рядов данных динамической системы, которые являются аппроксимациями собственных векторов и собственных значений оператора Купмана [20]. Пусть V_1^n – это серия векторных данных, называемых снимками, с равноотстоящими временными шагами между снимками

$$V_1^n = \{v_1, v_2, \dots, v_k\}, \quad v_i \in \mathbb{R}^N. \quad (5)$$

Требуется найти линейный оператор A , определяющий поведение временного ряда через соотношение

$$v_{i+1} = Av_i \text{ for } i = 1, \dots, k-1$$

. В матричной форме это соотношение может быть записано в виде

$$V_1^{k-1} = AV_2^k \quad (6)$$

где $V_1^{k-1} = \{v_1, v_2, \dots, v_{k-1}\}$ и $V_2^k = \{v_2, v_3, \dots, v_k\}$.

Задача (6) может быть решена в терминах наилучшего приближения A по норме Фробениуса с помощью сингулярного разложения (SVD).

Результирующая матрица A представляет собой аппроксимированный оператор Купмана, и тогда после усечения по рангу ее сингулярного разложения можно найти малое число ведущих динамических мод. Отсюда становятся понятными некоторые принципиальные моменты методологии ДМД: количество снимков n должно быть намного меньше исходной размерности данных N , это позволяет построить решение задачи (6) в разумные сроки; набор векторов снимков должен содержать как можно больше информации об изучаемой проблеме. Например, в течение некоторого времени $t < T$ матрица окон V_1^k может содержать нулевые строки, так как концентрации крупных частиц $c_k(t) \approx 0$. Это может иметь место в тех случаях, когда процесс коагуляции просто не может выйти на эти переменные при $t < T$ и их влиянием на систему на данном этапе можно пренебречь. Такой ситуации следует избегать при поиске базиса.

Применение ДМД заключается в следующем: сначала необходимо решить исходную систему уравнений для последовательности шагов по времени с использованием какой-либо стандартной схемы интегрирования по времени (в нашей работе мы используем явный метод Рунге-Кутты 2-го порядка) до тех пор, пока $t < t^*$. Затем эти данные (набор снимков) становятся основой для редуцированной модели и, наконец, редуцированная модель ДМД позволяет продолжить расчеты для дальнейшего времени $t > t^*$. Сложность тренировочного процесса при ДМД не зависит от сложности начального процесса интегрирования времени для системы, будь то бинарная или тройная коагуляция. Таким образом, мы рассматриваем вычислительные тесты для бинарной коагуляции (2), а также для модели комбинированной бинарной и тройной агрегации (4) со стоком частиц, превышающим размер $N = 10000$. Обучающая выборка представляет собой решение для первых 1000 шагов по времени с шагом по времени $\tau = 0,01$, а затем сокращенное решение на основе ДМД на основе 25 ведущих динамических мод продолжается вместо исходной полной задачи для дополнительных 4000 шагов по времени. В этой работе мы используем пакет `руDMD` с открытым исходным кодом, позволяющий проводить подобные численные эксперименты.

Мы демонстрируем результаты вычислительных экспериментов для случая бинарной коагуляции (2) на рисунке 1. На этом рисунке мы сравниваем решения на основе ДМД с решениями, построенными после решения полной исходной задачи со схемой интегрирования по времени. Различия в распределении частиц по размерам становятся заметными после 5000 временных шагов и оказываются существенными только для концентраций крупных частиц (для $c_k(t)$ с $k \geq 6000$). В случае, учитывающем дополнительно тройную коагуляцию разница между двумя решениями еще меньше (см. рисунок 2).

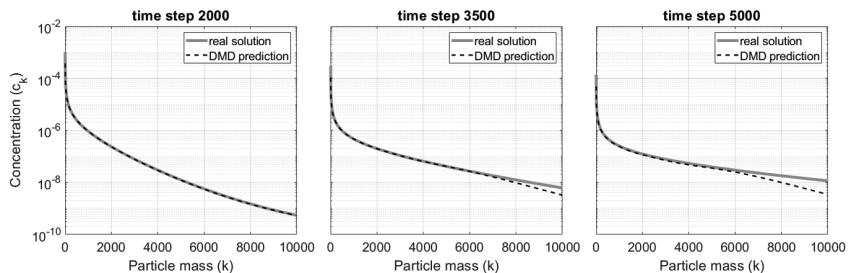


Рис. 1. Сравнение реального распределения размеров частиц бинарной задачи коагуляции и решения, предсказанного ДМД, на 2000, 3500 и 5000 временных шагах.

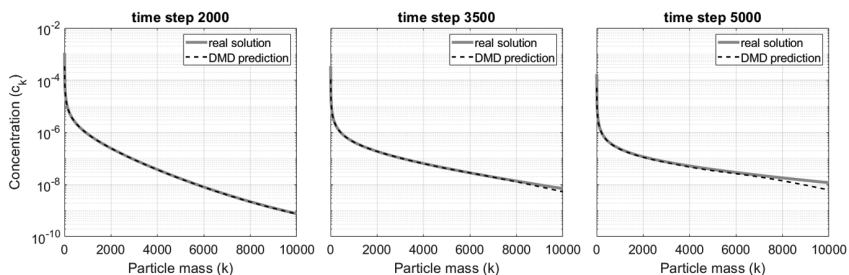


Рис. 2. Сравнение реального распределения частиц по размерам комбинированной бинарной и тройной задачи коагуляции 4 и ДМД-прогноза на 2000, 3500 и 5000 временных шагах.

Использование искусственных нейронных сетей

Другой основанный на данных подход к решению уравнений коагуляции основан на применении искусственных нейронных сетей ИНС [25]. Идея этого подхода заключается в аппроксимации решения системы с помощью ИНС как сложного параметрического набора функций. Следуя стандартной методике, мы обучаем нейронную сеть на начальной временной зависимости решения, а затем пытаемся предсказать решение на более позднее время. Другими словами, мы пытаемся найти решение задачи Коши для системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \frac{du}{dt} = f(u, t), & 0 < t \\ u(t = 0) = u_0, \end{cases} \quad (7)$$

где $u(t)$ соответствует вектору концентраций $c_k(t)$, а $f(u, t)$ правой части уравнений коагуляции. Сеть должна быть обучена удовлетворять условию

$$NN(t) \approx u(t), \quad 0 < t < t_0 \quad (8)$$

Следовательно, вход предлагаемой ИНС – это временная метка, а выход – аппроксимация снимка решения на этой временной метке. Количество размерностей выхода равно размерности вектор-функции $u(t)$, что соответствует количеству уравнений N в исследуемых моделях коагуляции.

Как было сказано ранее, на вход подается одно число, а на выходе – вектор той размерности, которая нам нужна в исходной системе. Остальная часть структуры нейронной сети представляет собой скрытые слои. Мы исследуем сеть с 30 линейными скрытыми слоями и с 30 нейронами в каждом слое с пакетной нормализацией. Функция активации между слоями – это Leaky ReLU, которая дает ненулевой градиент для всех входных значений

$$\text{Leaky ReLU}(x) = \begin{cases} ax, & x < 0 \\ x, & x > 0 \end{cases}. \quad (9)$$

где a – входит в «модель» в качестве параметра для обучения см. например [37],[38],[25]. Следующим элементом структуры ИНС является функция потерь. Мы выбираем стандартную квадратичную функцию потерь

$$\mathcal{L} = \langle (NN(t) - u(t))^2 \rangle. \quad (10)$$

для общих тестов сходимости.

Мы рассматриваем «тонкую глубокую сеть» как общую структуру. Такая структура имеет много скрытых слоев с небольшим количеством нейронов внутри. Сети с такой структурой с большей вероятностью будут повторять нелинейное поведение исходной системы, чем сети с небольшим количеством слоев. Широкие неглубокие сети позволяют получить контролируемую скорость обучения [26], однако в [27] показано, что результаты обучения широких сетей могут быть неустойчивыми по отношению к малым возмущениям данных и структуры весов. Для прогнозирования использовалась сеть с 8 скрытыми слоями по 10 нейронов в каждом.

Мы тестируем подход на основе ИНС для той же бинарной задачи (2), что и ДМД, где $N = 10000$ и шаг по времени $\tau = 0,01$. Основа обучения состоит из первых 1000 «отсечений» решения, и, наконец, мы выбираем модель, дающую наилучший результат с точки зрения функции потерь (10). Набор проверки состоит из следующих 1000 снимков решения. Мы используем метод оптимизации ADAM (Adaptive Moment Estimation [29]) для обучения изученных ИНС (см. рисунок 3).

Мы обучаем сеть до тех пор, пока она не даст почти точное решение на снимках обучения от 1 до 1000 временных шагов, как показано на рисунке 4. Однако ИНС едва ли может предсказать дальнейшее поведение процесса в отличие от метода ДМД. На рисунке 5 видно, что сеть теряет форму решения довольно непредсказуемым образом. Следовательно, нейронный подход для моделирования на основе

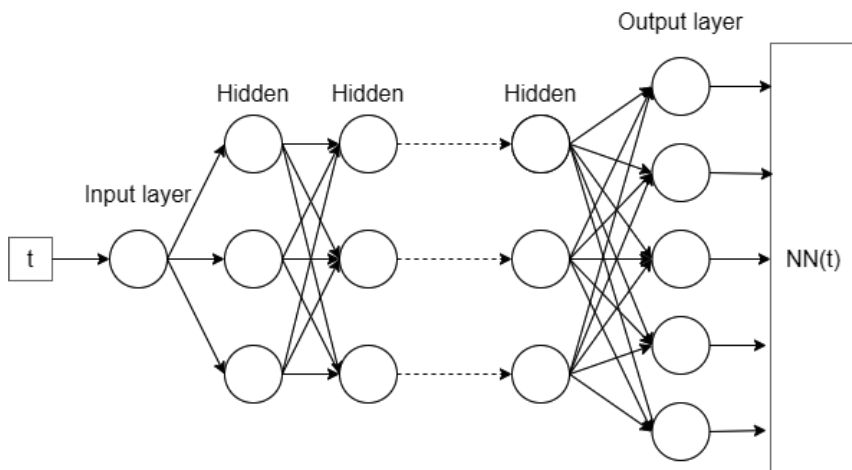


Рис. 3. Структура используемой нейронной сети. Количество нейронов в скрытом слое равно 10, количество скрытых слоев равно 8, количество нейронов выходного слоя равно размерности исходной задачи $N = 10000$.

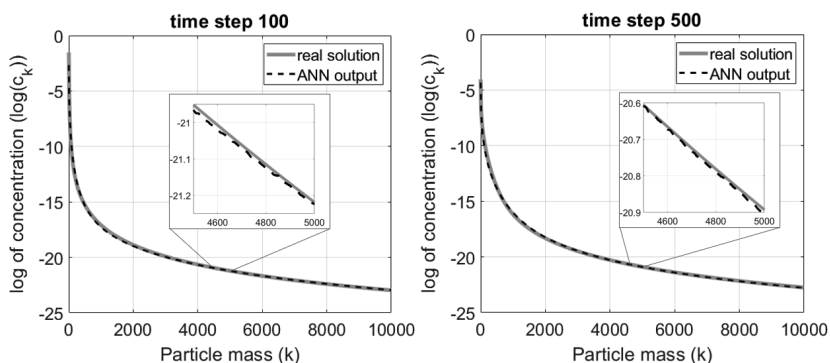


Рис. 4. Систематическая ошибка подхода, основанного на ИНС, не может быть устранена, даже если точность кажется высокой.

данных, дает неудовлетворительные результаты в отличие от методов редукции модели с помощью ДМД.

Закключение и обсуждение результатов

Мы изучили два подхода для моделирования кинетики агрегации, описываемой уравнениями Смолуховского для бинарной и тройной коагуляции, на основе данных. Это нужно для точного предсказания

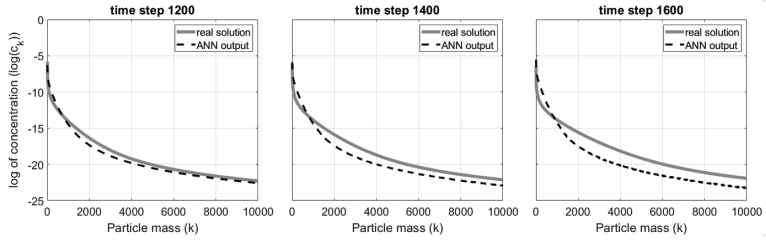


Рис. 5. Растущая погрешность между исходным решением и результатами, основанными на ИНС, соответствует низкой точности подхода, основанного на ИНС.

эволюции системы на большие времена; прямое применение стандартных численных методов для больших систем нелинейных ОДУ чрезвычайно затратно в вычислительном отношении. Первый подход представляет собой декомпозицию по динамическим модам (ДМД), а второй основан на искусственных нейронных сетях (ИНС). Мы нашли численное решение уравнений Смолуховского для конечного числа уравнений за некоторое полное время $\mathcal{T}$. Затем мы использовали это решение для части общего времени, $t \leq q\mathcal{T}$, в качестве обучающей выборки и сделали прогноз для остального времени, $t > (1 - q)\mathcal{T}$ (обычно мы используем $q = 0.25$). Прогнозируемое решение сравнивалось с реальным, что позволяет оценить точность прогноза. Мы обнаружили, что в то время как прогноз на основе ДМД дает постепенно увеличивающуюся невязку, которая влияет только на концентрации крупных агрегатов, подход на основе ИНС почти не определяет общую форму распределения частиц по размерам. Это дает невязку сравнимой величины для концентраций больших и малых агрегатов; это указывает на отсутствие предсказания структуры решения. Напротив, подход ДМД продемонстрировал способность прогнозирования с умеренной невязкой для временного интервала, в пять раз превышающего интервал обучения. Хотя ошибка предсказания концентраций крупных агрегатов значительна, предсказанные концентрации достаточно точны для большинства агрегатов, особенно для мелких частиц. Следовательно, подход на основе ДМД, который требует только последовательности снимков, позволяет прогнозировать решение уравнений коагуляции для больших систем уравнений. Вычислительная сложность метода не возрастает для сложных процессов коагуляции, т.е. для неоднородной и многочастичной агрегации. Это делает метод ДМД перспективным инструментом для моделирования таких систем. Поскольку прямое применение метода ИНС не позволило предсказать эволюцию системы коагуляции, мы ожидаем, что необходим более сложный подход, основанный на ИНС. Возможное

решение может заключаться в реализации физически информированных нейронных сетей [30] с использованием специально адаптированных функций потерь, учитывающих дополнительную информацию о свойствах системы.

Мы предлагаем направить дальнейшие исследования нейросетевого подхода в сторону физически информированных сетей [30]. Он может включать в себя некоторые другие формы функций потерь, учитывающие некоторую дополнительную информацию об изучаемой нелинейной модели, соответствующей конкретному физическому процессу.

Литература

1. *Anderson V. J., Lekkerkerker H. N. W.* Insights into phase transition kinetics from colloid science //Nature. – 2002. – Т. 416. – №. 6883. – С. 811-815.
2. *Stradner A. et al.* Equilibrium cluster formation in concentrated protein solutions and colloids //Nature. – 2004. – Т. 432. – №. 7016. – С. 492-495.
3. *Falkovich G., Stepanov M. G., Vucelja M.* Rain initiation time in turbulent warm clouds //Journal of applied meteorology and climatology. – 2006. – Т. 45. – №. 4. – С. 591-599.
4. *Falkovich, G., Fouxon, A., Stepanov, M.,* Acceleration of rain initiation by cloud turbulence. Nature 419(6903), 151–154 (2002)
5. *Krapivsky P. L., Redner S., Ben-Naim E.* A kinetic view of statistical physics. – Cambridge University Press, 2010.
6. *Leyvraz F.* Scaling theory and exactly solved models in the kinetics of irreversible aggregation //Physics Reports. – 2003. – Т. 383. – №. 2-3. – С. 95-212.
7. *Smoluchowski M.* Drei vortrage uber diffusion, brownsche bewegung und koagulation von kolloidteilchen //Zeitschrift fur Physik. – 1916. – Т. 17. – С. 557-585.
8. *Matveev S. A. et al.* Numerical studies of solutions for kinetic equations with many-particle collisions //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2019. – Т. 1163. – №. 1. – С. 012008.
9. *Stefonishin D. A., Matveev S. A., Zheltkov D. A.* Tensors in modelling multi-particle interactions //International Conference on Large-Scale Scientific Computing. – Springer, Cham, 2019. – С. 173-180.
10. *Timokhin I. V. et al.* Method for reduced basis discovery in nonstationary problems //Doklady Mathematics. – Pleiades Publishing, 2021. – Т. 103. – №. 2. – С. 92-94.

11. *Timokhin I. V. et al.* Model reduction in Smoluchowski-type equations //Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2022. – T. 37. – №. 1. – C. 63-72.
12. *Kruis F. E., Maisels A., Fissan H.* Direct simulation Monte Carlo method for particle coagulation and aggregation //AIChE Journal. – 2000. – T. 46. – №. 9. – C. 1735-1742.
13. *Sorokin, A., Strizhov, V., Demin, M., Smirnov, A.,* Monte-carlo modeling of aerosol kinetics. Atomic Energy 117(4), 289 (2015)
14. *Kalinov A. et al.* Direct simulation Monte Carlo for new regimes in aggregation-fragmentation kinetics //Journal of Computational Physics. – 2022. – T. 467. – C. 111439.
15. *Boje, A., Akroyd, J., Sutcliffe, S., Kraft, M.,* Study of industrial titania synthesis using a hybrid particle-number and detailed particle model. Chemical Engineering Science 219, 115615 (2020)
16. *Boje A., Kraft M.* Stochastic population balance methods for detailed modelling of flame-made aerosol particles //Journal of Aerosol Science. – 2022. – T. 159. – C. 105895.
17. *Schmid P. J.* Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data //Journal of fluid mechanics. – 2010. – T. 656. – C. 5-28.
18. *Matsumoto D., Indinger T.* On-the-fly algorithm for dynamic mode decomposition using incremental singular value decomposition and total least squares //arXiv preprint arXiv:1703.11004. – 2017.
19. *Kutz J. N. et al.* Dynamic mode decomposition: data-driven modeling of complex systems. – Society for Industrial and Applied Mathematics, 2016.
20. *Mezic I.* Spectral properties of dynamical systems, model reduction and decompositions //Nonlinear Dynamics. – 2005. – T. 41. – №. 1. – C. 309-325.
21. *Berkooz G., Holmes P., Lumley J. L.* The proper orthogonal decomposition in the analysis of turbulent flows //Annual review of fluid mechanics. – 1993. – T. 25. – №. 1. – C. 539-575.
22. *Timokhin I. et al.* Model reduction for Smoluchowski equations with particle transfer //Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling. – 2021. – T. 36. – №. 3. – C. 177-181.
23. *Brenner A.* Model of many-particle aggregation in dense particle systems //Chemical Engineering Transactions. – 2014. – T. 38. – C. 145-150.
24. *Krapivsky P. L.* Aggregation processes with n-particle elementary reactions //Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1991. – T. 24. – №. 19. – C. 4697.

25. *Lagaris I. E., Likas A., Fotiadis D. I.* Artificial neural networks for solving ordinary and partial differential equations //IEEE transactions on neural networks. – 1998. – T. 9. – №. 5. – C. 987-1000.
26. *Barron A. R.* Universal approximation bounds for superpositions of a sigmoidal function //IEEE Transactions on Information theory. – 1993. – T. 39. – №. 3. – C. 930-945.
27. *Tyukin I. Y., Higham D. J., Gorban A. N.* On adversarial examples and stealth attacks in artificial intelligence systems //2020 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN). – IEEE, 2020. – C. 1-6.
28. *Tyukin I. Y. et al.* The Feasibility and Inevitability of Stealth Attacks //arXiv preprint arXiv:2106.13997. – 2021.
29. *Kingma D. P., Ba J.* ADAM: A method for stochastic optimization //arXiv preprint arXiv:1412.6980. – 2014.
30. *Pun G. P. et al.* Physically informed artificial neural networks for atomistic modeling of materials //Nature communications. – 2019. – T. 10. – №. 1. – C. 1-10.
31. *Poschel T., Brilliantov N. V., Frommel C.* Kinetics of prion growth //Biophysical journal. – 2003. – T. 85. – №. 6. – C. 3460-3474.
32. *Silk J., White S. D.* The development of structure in the expanding universe //The Astrophysical Journal. – 1978. – T. 223. – C. L59-L62.
33. *Brilliantov N. et al.* Size distribution of particles in Saturn's rings from aggregation and fragmentation //Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2015. – T. 112. – №. 31. – C. 9536-9541.
34. *Esposito L.* Planetary Rings Cambridge University Press. – 2006.
35. *Brilliantov N. V., Formella A., Poschel T.* Increasing temperature of cooling granular gases //Nature communications. – 2018. – T. 9. – №. 1. – C. 1-9.
36. *Matveev S. A., Krapivsky P. L., Smirnov A. P., Tyrtshnikov E. E., Brilliantov N. V.* (2017). Oscillations in aggregation-shattering processes. Physical review letters, 119(26), 260601.
37. *Bernard E.,* Introduction to Machine Learning . Wolfram Media Inc., (2006)
38. *Schmidhuber J.* Deep learning in neural networks: An overview //Neural networks. – 2015. – T. 61. – C. 85-117.
39. *Mikhaylov A. et al.* Learned Query Optimizers: Evaluation and Improvement //IEEE Access. – 2022. – T. 10. – C. 75205-75218.
40. *Koldasbayeva D. et al.* Large-scale forecasting of Heracleum sosnowskyi habitat suitability under the climate change on publicly available data //Scientific reports. – 2022. – T. 12. – №. 1. – C. 1-11.