"Утверждаю"

Зам.директора ИПМ
им. М.В.Келдыша РАН,
д.ф.м.н., проф. В.Ф.Тишкин

3 ноября 2014 г.

Отзыв

ведущей организации на диссертационную работу

Долгова С. В. "Алгоритмы и применения тензорных разложений для численного решения многомерных нестационарных задач",

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 -- вычислительная математика.

Диссертация Долгова С.В. посвящена актуальному и активно развивающемуся разделу вычислительной математики - созданию вычислительных методов, которые сочетают в себе сильные стороны как оптимизационных тензорных алгоритмов переменных направлений, так и классических приближенных итерационных схем. Необходимость таких построений очевидна, т.к. главной вычислительной проблемой в многомерных задачах является сложность хранения дискретных решений и операторов, поскольку при использовании сеточных дискретизаций число неизвестных растет экспоненциально с размерностью задачи. В связи с этим, долгое время для решения многих важных физических задач описываемых уравнениями Власова, Фоккера-Планка, основного кинетического и др. в основном использовались методы стохастической дискретизации, такие как Монте Карло.

Как альтернативный вариант, для решения многомерных уравнений было предложено сжатие данных с использованием разделения переменных и малорангового разложения матрицы. Тем не менее, существовавшие ранее численные методы работы со сжатыми малоранговыми представлениями были недостаточно эффективны для достаточно общего класса задач.

В диссертации разработаны новые алгоритмы, которые позволяют достаточно быстро и точно находить малоранговые приближения к решениям сверхбольших систем уравнений, в том числе и возникающих при дискретизации уравнения Власова и основного кинетического уравнения.

Актуальность работы обусловлена большим интересом к высокоточным методам моделирования случайных физических процессов. Так, например, клеточные процессы, такие как транскрипция и репликация генов или производство белков, являются принципиально стохастическими. Однако, непосредственное решение основного кинетического уравнения невозможно за исключением очень малых систем из-за его огромного размера. В настоящий момент основной используемый метод (Stochastic Simulation Algorithm) моделирует вместо этого ансамбль реализаций клеток со случайными течениями реакций в каждой из них, после чего производится усреднение требуемых величин. Недостатком такого подхода является медленная сходимость численной аппроксимации статистик, порядка $O(1/\sqrt{N})$ в соответствии с законом больших чисел. Хотя суммарное число неизвестных все-таки меньше, чем в основном кинетическом уравнении, оно все же зачастую требуется слишком большим (десятки-сотни миллионов) для достижения удовлетворительной точности.

Методы тензорных разложений развиваемые в диссертации дают новую возможность детерминистского моделирования стохастической задачи, при этом затраты памяти и процессорного времени оказываются намного меньше, чем в стохастическом моделировании.

Научная новизна работы и основных результатов.

В работе представлен новый алгоритм решения уравнений непосредственно в сжатом представлении коэффициентов решения. Доказана теорема о сходимости к решению исходной многомерной задачи для вычислительно эффективного алгоритма переменных направлений в тензорном представлении. Разработанный метод позволил получить численное решение основного кинетического уравнения для λ-фага с высокой точностью, недоступной ранее ни для стохастических алгоритмов, ни для других алгоритмов, использующих сжатое представление решения. Проведенные расчеты Фарлей-Бунемановской неустойчивости являются первым применением методов тензорных приближений для нелинейной кинетической модели плазмы.

Содержание диссертационной работы.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, литературы и списка основных обозначений.

Во введении излагается актуальность, цели и краткое описание результатов работы.

Первая глава посвящена формулировке моделей Фарлей-Бунемановской неустойчивости и основного кинетического уравнения на непрерывном уровне, а также их дискретизаций.

Поскольку уравнение Власова рассматривается на кубической области с периодическими граничными условиями, для его пространственной дискретизации применены стандартные схемы конечных разностей, Мак-Кормака и интерполяции с характеристик, использовавшиеся и в предыдущих работах по Фарлей-Бунемановской неустойчивости.

Для дискретизации по времени используется двуцикличная схема расщепления по физическим процессам и координатам. Поскольку основное кинетическое уравнение изначально является линейным обыкновенным дифференциальным уравнением (но сверхбольшого размера), для его дискретизации по времени достаточно схем Кранка-Николсон и Эйлера. Отдельно стоит отметить, что малоранговые разложения успешно применимы не только для разделения пространственных переменных, но и для ускорения интегрирования по времени. Для этого в первой главе показывается расширение схем Кранка-Николсон и Эйлера, доказывается корректность новой постановки.

Во вторая главе подробно изложены методы разделения переменных и известные базовые алгоритмы (процедуры аппроксимации, вычисления сумм и матричных произведений) для работы со малоранговыми форматами данных: каноническим (CP), форматом Таккера и TT.

Показано систематическое преобразование матриц и векторов в многомерные тензоры с дальнейшим их приближением малоранговым форматом (т.н. QTT аппроксимация), что позволяет в определенных случаях сократить затраты памяти до логарифмического по отношению к исходному объему.

Данные сведения представляют собой обзор современной литературы по тензорным приближениям; однако во второй части главы приводится новая комбинация разложений TT, QTT и Таккера, которая является более эффективной, чем каждый из исходных форматов в отдельности и являются авторской.

Третья глава содержит анализ структуры разделения переменных для типовых начальных данных и операторов, возникающих в рассматриваемых приложениях.

Построены аналитические TT форматы для матриц перехода в явной схеме интегрирования уравнения Власова и матрицы основного кинетического уравнения, что обосновывает применимость предложенных алгоритмов на начальном этапе.

В четвертой главе излагаются алгоритмы решения систем линейных уравнений в TT формате. Поскольку все вычисления необходимо проводить только с элементами сжатого формата, рассматриваются исключительно итерационные методы. Дается обзор двух основных классов итерационных методов: модифицированных классических методов линейной алгебры (простых итераций, GMRES) и специальных методов переменных направлений для малоранговых представлений (Alternating Least Squares, Density Matrix Renormalization Group). Обсуждаются преимущества и недостатки тех и других методов.

Замечено, что преимущества классических итераций (адаптивность формата данных, наличие теории сходимости) дополняют численную эффективность методов переменных направлений. На основе этого наблюдения предложен новый алгоритм (Alternating Minimal Energy), сочетающий шаги как метода градиентного спуска, так и переменных направлений.

Для метода Alternating Minimal Energy теоретически доказана сходимость к точному решению системы уравнений с любого начального приближения. Не менее важно то, что численные эксперименты показывают более высокую эффективность нового алгоритма по сравнению с методами GMRES в TT формате и Density Matrix Renormalization Group.

Этот результат является новым т.к. утверждения о глобальной сходимости были неизвестна для алгоритмов переменных направлений, а методы типа GMRES имеют слишком высокую вычислительную сложность.Отдельно стоит отметить исчерпывающее описание практической реализации алгоритма, а также доступный программный код.

Пятая глава посвящена применению предложенных методов к практическим примерам модели Фарлей-Бунемановской плазменной неустойчивости и основного кинетического уравнения для стохастических клеточных процессов.

Особенно стоит отметить эксперименты с 20-мерной моделью каскада генетических реакций, а также реального вируса λ-фага.

Показано, что новые численные алгоритмы являются эффективными инструментами для данных сверхбольших задач и позволяют получать результаты с достаточной точностью существенно быстрее, чем ранее известные подходы, как среди Монте Карло методик, так и среди других методов в малоранговых представлениях.

Решение уравнений Фарлей-Бунемановской неустойчивости проводится с модельными параметрами, что однако не умаляет его релевантности для проверки численных схем, в чем и заключается основная цель диссертации.

Показано, что новые алгоритмы правильно предсказывают поведение плазмы, требуя при этом значительно меньше оперативной памяти, чем ранее используемые подходы с хранением всех коэффициентов ионного распределения.

Заключение содержит **основные результаты и выводы диссертации**.

- Предложен новый вычислительный алгоритм (Alternating Minimal Energy) для быстрого решения больших систем линейных уравнений и приближенного вычисления матричных произведений с представлением всех данных в малоранговых форматах с разделенными переменными.

Метод является более предпочтительным по сравнению с ранее применяемыми способами решения систем уравнений в тензорных форматах как с теоретической, так и с практической точек зрения.

- Построены малоранговые представления для матриц перехода уравнения Власова и матрицы основного кинетического уравнения, подтверждающие эффективность сжатия по крайней мере входных данных в этих задачах.
- Проведены обширные численные эксперименты, в которых рассматривается как общая применимость разработанных методик к прикладным задачам, так и более детальное исследование влияния параметров алгоритмов.
- Показано, что новый алгоритм мало чувствителен к выбору специфического для него параметра (ТТ ранга невязки) и может быть использован как достаточно надежный инструмент для решения сложных несимметричных и нелинейных задач.

Практическая ценность диссертационной работы. Рекомендации к применению.

Разработанные методы могут использоваться для эффективного решения различных вероятностных и квантовых уравнений. С дальнейшим развитием алгоритмов, и сочетанием как новых методов, так и высокопроизводительных систем, возможно проведение расчетов со сверхбольшими задачами, недоступными ранее никакими методами.

В качестве примеров таковых можно отметить прежде всего подробные модели ионосферы с учетом влияния плазмы, а также новые модели в биологии и медицине (исследования клеточных процессов, производство вакцин).

По всей видимости, систематический подход к аппроксимации многомерных задач позволит совместить решения прямой задачи моделирования поведения системы и обратной задачи идентификации параметров и/или начальных данных. Это особенно важно в биологии, где часто возникает нехватка экспериментальных данных, и требуется восстанавливать недостающие параметры.

Математическая теория, разработанная в диссертации, основана на матричном анализе и линейной алгебре и может быть использована в дополнительных спецкурсах, читаемых студентам соответствующих специальностей.

Дальнейшее развитие и использование полученных в диссертации результатов можно рекомендовать осуществлять в академических институтах (Институт вычислительной математики РАН, Вычислительный центр им. А.А.Дородницына РАН, Институт прикладной математики им. Келдыша РАН, Математический институт им. Стеклова РАН), а также в учебных заведениях (Московском государственном университете им. М.В.Ломоносова, Московском физико-техническом институте).

Соответствие специальности.

Диссертационная работа посвящена разработке новых вычислительных алгоритмов для расчета математических моделей процессов в физике и биологии.

Тематика исследования, результаты работы и оформление полностью соответствуют специальности 01.01.07 -- вычислительная математика.

Обоснованность научных положений.

Данные научные исследования можно характеризовать как научно-обоснованные разработки, обеспечивающие решение сложных больших задач в области моделирования случайных процессов.

Достоверность работы и результатов подтверждаются корректностью применения математического аппарата численного анализа и линейной алгебры,

использованием апостериорных индикаторов ошибок, сравнением и согласованностью результатов расчетов с применением новых методов с ранее известными.

Оформление и соответствие требованиям ВАК.

Изложение работы достаточно подробно и полно иллюстрировано, используемые обозначения согласованы, материал изложен последовательно. Результаты диссертационной работы достаточно хорошо апробированы.

По теме диссертации опубликовано 7 работ в журналах из Перечня ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, рекомендованных ВАК, автором сделано 16 докладов на международных конференциях и семинарах.

Все основные результаты (алгоритм Alternating Minimal Energy, аналитические сжатые представления матриц в уравнениях Власова и основного кинетического, численные эксперименты) получены лично автором.

Содержание автореферата полностью отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертация несомненно соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.01.07 -- вычислительная математика.

Замечания.

В первой главе - «Многомерные вероятностные уравнения» описываются уравнения, на которых опробуется предлагаемый автором численный метод. Выбор моделей весьма интересен. Параграф первый посвящён варианту кинетического уравнения Власова для описания процессов в ионосфере (Фарлей-Бунемановская неустойчивость).

- На стр. 21 выводится жидкостная модель электронов – уравнение (1.3). Здесь неясно, насколько это громоздкое уравнение помогает по сравнению с простыми исходными уравнениями (1.1).
- На стр. 23 введена кинетическая модель для ионов – уравнение Власова-БГК (1.5). Уравнение пишется с интегралом столкновений ионов с ионами, но об этих столкновениях можно не заботиться, обычно сталкиваются ионы и электроны с нейтралами. Кроме того требует объяснений и вид БГК-интеграла, где обычно в стандартной форме ещё пишут среднюю скорость. Она у авторов модели нулевая, чем это навязывается?
  Наверное, это вопросы не к соискателю, но их наличие говорит о том, что свой метод численного решения надо бы было тестировать и применять к более проверенным классическим модельным задачам и уравнениям, а вовсе не на конкретной физической задаче в неконтролируемых условиях с заведомо непроверяемыми и весьма приближёнными уравнениями.
- Из текста диссертации неясно, что такое Фарлей-Бунемановская неустойчивость. Неустойчивость чего и относительно каких возмущений?
- Второй параграф (стр.30) описывает стохастическую химическую кинетику. Описание «классического вида» реакции не совсем классично: обычно берут два разных индекса справа и слева, а не прибавляют z, либо надо оговаривать, что z может быть неположительно. Кроме того, обычно не ставят индекс m, а нумеруют реакции самими парами индексов. Тогда и (1.15) записывается проще.
- Фраза на стр. 134 « как было показана в [121], все собственные значения оператора ОКУ в (1.17) имеют неположительные вещественные части» составляет часть как минимум теоремы Фробениуса. Фраза «Однако, если и … все собственные значения имеют строго отрицательные действительные части» выглядит очень странно, т.к. для любой стохастической матрицы одно собственное значение ноль, что соответствует закону сохранения числа частиц. Или это недостаток аппроксимации?
- «Замечание 1.2.3. Кратность ядра A требует дополнительного рассмотрения. Как было показано в [101], определенная неизбыточность набора веществ и реакций гарантирует единственность стационарного решения». Это замечание связывает результаты эргодической теоремы А.А.Маркова с выложенными в архив в 2013 году. Идентичны ли они? Скорее всего, теорема Маркова более общая. Но что подразумевается под кратностью ядра A? Кратность собственных чисел?

- В работах автора осталось незамеченным, что именно линейные законы сохранения, соответствующие атомам различных элементов, требуется отслеживать при переходе к любым численным методам.
- Имеются и претензии к оформлению автореферата и диссертации. Соискателю надо усвоить, что надо писать банахово пространство, но теорема Банаха. Аналогично с таккеровскими форматами и т.д.

Общие выводы.

Приведенные замечания не снижают общую положительную оценку диссертационной работы. Диссертация представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, в которой решены важные и крайне актуальные задача вычислительной математики. Уровень исследований, значительно превосходит требования обычно предъявляемым к кандидатским диссертациям. Достоверность и новизна результатов соответствуют требованиям ВАК.

Автор диссертации, Долгов Сергей Владимирович, безусловно заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 -- вычислительная математика.

Отзыв рассмотрен и одобрен на семинаре им. К.И. Бабенко Института прикладной математики им. Келдыша РАН 3 ноября 2014 года, протокол № 1.

заместитель директора по научной работе
д.ф.-м.н., Афендиков А. Л.