

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.045.01 НА БАЗЕ  
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ  
НАУКИ ИНСТИТУТА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ РОССИЙСКОЙ  
АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело №  
решение диссертационного совета от 27.12.2017 № 36

о присуждении Рахубе Максиму Владимировичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Тензорные методы решения многомерных частичных задач на собственные значения» по специальности 01.01.07 – «Вычислительная математика» принята к защите 25 октября 2017 г., протокол № 1, диссертационным советом Д 002.045.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительной математики Российской академии наук (ИВМ РАН), по адресу 119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, приказ о создании диссертационного совета № 1074-в от 11 июля 2003 г.

Соискатель Рахуба Максим Владимирович, 1991 года рождения, в 2014 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Соискатель в 2017 году окончил аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)». В настоящее время Рахуба Максим Владимирович работает в Сколковском институте науки и технологий в должности младшего научного сотрудника.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном

образовательном учреждении высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

**Научный руководитель** – доктор физико-математических наук, **Оседец Иван Валерьевич**, доцент Сколковского института науки и технологий.

#### **Официальные оппоненты**

**Корнеев Вадим Глебович**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры параллельных алгоритмов математико–механического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет»;

**Хоромский Борис Николаевич**, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Института математики в науках Общества Макса Планка (Max-Planck Institute für Mathematik in den Naturwissenschaften), дали положительные отзывы на диссертацию.

**Ведущая организация** – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет», в своем положительном заключении, подписанном **Бадриевым Ильдаром Бурхановичем**, доктором физико-математических наук, профессором кафедры вычислительной математики отделения прикладной математики и информатики Института вычислительной математики и информационных технологий Казанского (Приволжского) федерального университета, и утвержденном проректором по научной деятельности Казанского (Приволжского) федерального университета, доктором геолого-минералогических наук **Нургалиевым Данисом Карловичем**, указала, что работа соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК Минобрнауки России, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – «Вычислительная математика», а её автор Рахуба Максим Владимирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Соискатель имеет 10 опубликованных работ по теме диссертации:

- [1] *Rakhuba M.V., Oseledets I.V.*, Calculating vibrational spectra of molecules using tensor train decomposition // *The Journal of Chemical Physics*. — 2016. — Т. 145. — No. 12. — С. 124101.
- [2] *Rakhuba M.V., Oseledets I.V.*, Fast multidimensional convolution in low-rank tensor formats via cross approximation // *SIAM Journal on Scientific Computing*. — 2015. — Т. 37. — No. 2. — С. A565-A582.
- [3] *Rakhuba M.V., Oseledets I.V.*, Grid-based electronic structure calculations: the tensor decomposition approach // *Journal of Computational Physics*. — 2016. — Т. 312. — С. 19-30.
- [4] *Rakhuba M.V., Oseledets I.V.*, Jacobi-Davidson method on low-rank matrix manifolds // arXiv preprint arXiv:1703.09096. — 2017.
- [5] *Oseledets I.V., Rakhuba M.V., Uschmajew A.*, Alternating least squares as moving subspace correction // arXiv preprint: arXiv:1709.07286. — 2017.
- [6] *Rakhuba M.V.*, Block eigensolvers on low-rank tensor manifolds // *Proceedings of the 88-th Annual Meeting of the International Association of Applied Mathematics and Mechanics, Weimar, 2017*.
- [7] *Рахуба М. В.*, Малоранговые разложения многомерных массивов и их приложение в расчете колебательного спектра молекул // Сб. тез. конф. “Ломоносов 2017”, Москва, 2017.
- [8] *Рахуба М. В., Оселедец И.В.*, Методы решения многомерных задач на собственные значения на малоранговых тензорных многообразиях и их приложения в задачах квантовой химии // Тезисы 59-й научной конференции МФТИ, 2016.
- [9] *Rakhuba M.V.*, Making block eigensolvers really work in higher dimensions // *Proceedings of the 20-th Conference of the International Linear Algebra Society (ILAS), Leuven, 2016*.
- [10] *Рахуба М. В., Оселедец И.В.*, Быстрый алгоритм вычисления многомерной свертки на основе тензорных аппроксимаций и его применение для расчета электронной структуры молекул // Труды 56-й научной конференции МФТИ, 2013,

в том числе 3 работы [1–3] опубликованы в рецензируемых научных изданиях из списка Web of Science. В работе [1] предлагаются новые тензорные методы решения многомерных частичных задач на собственные значения с линейным оператором, проводится высокоточный расчет колебательного спектра молекулы ацетонитрила; в работе [3] предлагается новый тензорный метод решения задачи на собственные значения с нелинейным оператором на

примере уравнений Хартри–Фока и Кона–Шэма. В работе [2] предложен быстрый алгоритм вычисления многомерной свертки при использовании тензорных форматов. В работе [4] приведено обобщение метода Якоби–Дэвидсона при ограничении на ранги решения.

На автореферат поступил положительный отзыв от д.ф.-м.н. Книжнермана Л.А. В отзыве отмечается, что «работа выглядит фундаментально: автор рассмотрел многие вычислительные алгоритмы и их модификации и использовал, помимо прочего, аналитический аппарат (включая многообразия)».

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тематикой исследований, проведенных в диссертации. **Корнеев Вадим Глебович** является известным специалистом в области математической физики и вычислительной математики, а **Хоромский Борис Николаевич** – в области вычислительной математики и тензорных методов. Тематика диссертации соответствует области экспертизы ведущей организации.

Диссертация посвящена разработке эффективных тензорных методов решения многомерных задач на собственные значения, а также их теоретическому обоснованию. Известно, что существующие тензорные методы решения многомерных задач на собственные значения имеют сильную зависимость от числа собственных значений, которые требуется найти, а также от ранга разложений. Для поиска одного собственного значения и собственного вектора в работе предлагается обобщение методов Якоби–Дэвидсон и обратной итерации при ограничении на тензорные ранги решения. Исследуются вопросы сходимости методов. Для поиска нескольких собственных значений предлагается нелинейный предобуславливатель, примененный к тензорной версии метода LOBPCG. Также в работе рассматриваются задачи на собственные значения с нелинейным оператором на примере уравнений Хартри–Фока и Кона–Шэма. Для решения этих уравнений предлагается тензорный полностью сеточный метод, позволяющий решать уравнения с требуемой точностью. Для вычисления многомерных сверток, возникающих в этих уравнениях, предлагается быстрый тензорный метод, базирующийся на методе крестовой аппроксимации.

**Теоретическая значимость** работы состоит в теоретическом обосновании сходимости предлагаемых методов решения многомерных задач на собственные значения. Также в рамках диссертации разработана теория локальной сходимости метода попеременных направлений (ALS) для минимизации функционалов.

**Практическая значимость** работы заключается в возможности использования разработанных методов для решения многомерных частных задач на собственные значения, возникающих при дискретизации дифференциальных уравнений, а также для изначально дискретных задач, если известно, что решение может быть представлено с помощью тензорных разложений с малым числом параметров. Предложенные методы также могут быть использованы при решении задач малой размерности с помощью подхода квантизации. Реализованный программный код может быть адаптирован под конкретную прикладную задачу.

**Достоверность** полученных результатов обеспечивается использованием строгих математических доказательств, наличием подробного численного исследования, а также сравнением с результатами расчетов, полученных с помощью известных программных комплексов.

**Личный вклад соискателя.** Диссертационное исследование является самостоятельным законченным трудом соискателя. Лично соискателем были получены следующие результаты. Предложена идея малоранговой версии метода Якоби–Дэвидсона, исследованы теоретические свойства матрицы, возникающей при решении локальных систем в этом методе. Из тензорной версии метода Якоби–Дэвидсона получено обобщение метода обратной итерации на малоранговый случай. Также предложена идея предобуславливания на многообразиях с использованием ALS метода. Для уравнений Хартри–Фока и Кона–Шэма получена формула вычисления матрицы Фока без использования производных, а для вычисления многомерных сверток с помощью метода крестовой аппроксимации получена быстрая формула пересчета разложения. Для всех предложенных методов получены оценки сложности. Реализация и подготовка численных экспериментов для разработанных методов также была выполнена соискателем самостоятельно.

На заседании **27 декабря 2017 г.** диссертационный совет принял решение присудить **Рахубе Максиму Владимировичу** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 6 докторов наук по специальности 01.01.07 – «Вычислительная математика», участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали:

за 17, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного совета  
академик РАН



Тыртышников Евгений Евгеньевич

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физ.-мат. наук



Бочаров Геннадий Алексеевич

27.12.2017 г.