В диссертационный совет Д 002.045.01
Института вычислительной математики
Российской академии наук

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Рахубы Максима Владимировича

"Тензорные методы решения многомерных частичных задач на собственные значения",

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 "Вычислительная математика"

Диссертационная работа М. В. Рахубы посвящена разработке новых тензорных методов решения многомерных задач на собственные значения. Актуальность темы исследований не вызывает сомнений. Такие задачи особенно трудоемки с вычислительной точки зрения из-за экспоненциального роста числа степеней свободы в зависимости от размерности задачи. Для их успешного численного решения большой интерес представляет разработка малопараметрических представлений с целью эффективного сжатия многомерных массивов. Значительный успех в этом направлении пришелся на несколько последних десятилетий и был связан с развитием приближенных методов решения указанных задач в тензорных форматах. Задача переформулируется в тензорных форматах, как правило с сокращением общего числа степеней свободы, и решается с поддержанием тензорных форматов. При этом требуется решить ряд серьезных проблем: найти малопараметрическую формулировку, позволяющую тем не менее получить решение без значительных потерь точности и разработать новый аппарат тензорных операций, позволяющий вычислить приближенное решение с существенным выигрышем во времени вычислений. Справиться с первой проблемой помогает тот факт, что, как оказалось, малопараметрические тензорные формулировки могут аппроксимировать многие задачи с значительной точностью. Более того, были найдены тензорные форматы и приспособленный к ним вычислительный аппарат, обеспечивающий быстрое нахождение приближенных решений. Среди наиболее широко используемых и сравнительно хорошо изученных можно назвать формат Таккера (1966), иерархический формат Таккера (Хакбуш и Кун, 2009, Граседик, 2010) и ТТ-формат (tensor-train format, Оседедец и Тыртышников, 2009, Оселедец, 2011).

На пути повышения быстродействия численных солверов за счет использования малоранговых тензорных аппроксимаций были достигнуты значительные успехи. Однако в этой перспективной, сложной, быстро развивающейся области вычислительной математики остается много проблем. К ним относятся, в частности, совершенствование таких общих и широко применяемых процедур как ALS с использованием альтернирующих процедур наименьших квадратов и метод крестовой аппроксимации, получение более информативных оценок скорости сходимости итерционных процессов с учетом ограничения на рост в процессе вычислений ранга тензорных представлений, обоснование новых более эффективных методов решения сложных задач расчета спектров атомов и молекул, описываемых уравнениями Хартри-Фока и уравнениями Кона-Шэма, а также быстрого алгоритма для вычисления многомерной свертки. Именно этим проблемам посвящена диссертация М.В. Рахубы. Все изложенные им в диссертации результаты являются новыми, опираются на конкурирующие недавние работы известных авторов и изложены в 10 работах, опубликованных за исключением одной в 2016-2017 г.г. Стоит особо подчеркнуть, что многие из предложений диссертации проверены посредством обстоятельных численных экспериментов с использованием программ, написанных автором диссертации.

Содержание работы. Работа состоит из Введения, четырех глав и Заключения, она изложена на 167 страницах, список литературы содержит 152 наименования. Во Введении в общей форме описывается цель работы, аргументируется ее актуальность и новизна, кратко формулируются результаты, выносимые на защиту, дается список статей по теме диссертации, опубликованных в рецензируемых и других научных изданиях.

Гл. 1 также можно назвать вводной, но уже к основным результатам диссертации, представленным в последующих главах. Описываются основные тензорные форматы, включая каноническое разложение, формат Таккера, TT-формат (формат тензорного поезда) и др., тензорная арифметика и реализующие ее пакеты программ, один из которых создан автором. Описаны также операции крестовой аппроксимации, интерполяции и округления тензоров, гильбертово пространство тензоров.

Значительное место в гл.1 отведено задаче на собственные значения в тензорных форматах и ее решению с использованием малоранговых представлений тензоров. Одна из основных проблем, которую при этом приходится решать, связана с возможностью значительного повышения ранга в процессе итераций и необходимостью после каждой итерации проектировать полученное приближение на многообразие тензоров меньшего ранга без существенной потери точности. Рассматривается двухслойная итерационная схема предобусловленного градиентного спуска с округлением по рангу на каждой итерации, приводится теорема О.С. Лебедевой о ее сходимости. Наиболее основательно представлена линейная схема попеременных направлений (ALS – alternating linear scheme). Рассмотрен ряд вопросов, связанных с ее применением для минимизации отношения Рэлея, решения систем лиейных алгебраических уравнений, минимизации функционалов на гладктих многообразиях и на сфере. С использованием результатов о сходимости метода декомпозиции области доказывается теорема о сходимости ALS, улучшающая результат Ровелдера и Ушмаева (Rohwedder & Uschmajew, 2013).

Гл. 2 посвящена новым алгоритмам решения в тензорных форматах задач на собственные значения с линейными операторами. С целью поиска одного собственного значения предлагаются обобщения метода Якоби-Дэвидсона и обратной итерации на малоганговых тензорных многообразиях с ускорениями на подпространствах. Исследуется сходимость этих методов, рассматриваются алгоритмы решения возникающих на итерациях ведущего итерационного процесса задач на подпространствах. Предлагаемая модификация с привлечением малоганговых тензорных аппроксимаций наследует преимущества оригинального метода Якоби-Дэвидсона. В отличие от итераций метода Рэлея и метода Дэвидсона, она эффективна как при точном, так и неточном решении возникающих на ведущих итерациях линейных систем уравнений.

Метод LOBPCG является классическим методом одновременного поиска нескольких собственных значений. Как извстно, рост ранга в процессе итераций лучше подавляется при наличии предобусловливателя. В диссертации предлагается эффективный нелинейный предобусловливатель. Метод проверяется на билинейном осцилляторе, для которого известно точное решение. Для молекулы ацетонитрила производится численное сравнение с другими известными алгоритмами.

Задача на собственные значения, возникающая в связи с расчетом электронного спектра атомов и молекул, и описываемая уравнениями Хартри-Фока и Кона-Шэма с нелинейными интегро-дифференциальными операторами привлекает внимание многих исследователей. Численные методы ее решения имеют ряд узких мест, отражающихся на точности и устойчивости приближенных решений и в конечном итоге на их относительной сложности. В гл. 3 автор вносит ряд улучшений в численные алгоритмы в тензорных форматах, поволяющих исключить или уменьшить влияние отрицательных факторов, и подтверждает это достаточно основательными численными экспериментами. В итерационном процессе, называемом итерационным процессом Грина, уравнения Хартри-Фока и Кона-Шэма преобразуются к форме Липпманна-Швингера, которую автор предпочитает как более удобную для реализации алгоритма в тензорных форматах. Рассматривается несколько приемов, позволяющих улучшить устойчивость вычислений и уменьшить арифметическую работу. Основные из них – вычисление матрицы Фока без использования численного дифференцирования, применение процедур вычисления интегралов типа сверток с использованием малоранговых форматов Таккера, получаемых методом крестовой аппроксимации. Рассмотрены два алгоритма получения крестовых аппроксимаций. Получена оценка арифметической сложности одной итерации $\mathcal{O}(r^4 + nr^2 + rn\log n)$. Автором диссертации разработан пакет программ на языке Pithon, с помощью которого протестированы основные модули пакета, решены задачи, связанные с расчетом орбиталей для некоторых молекул и атомов и кластеров атомов, проведено сопоставление точности и трудоемкости с пакетом программ GAMESS. Результаты вычислений в целом подтердили работоспособность положенных в основу пакета алгоритмов, возможность получения высокоточных результатов, и достаточно высокое быстродействие.

Вычисление интегралов типа сверток по многим переменным приходится выполнять в самых разнообразных областях науки и приложений. При выполнении ее стандартными методами эта операция весьма трудоемка. Например, она является наиболее трудоемкой операцией при решении уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, рассмотренных в гл. 3. Экономичным алгоритмам ее выполнения посвящено множество работ. В гл. 4 изучен новый вариант cross-conv алгоритма вычисления поэлементного произведения трехмерных массивов в формате Таккера при вычислении интегралов типа сверток, основанный на крестовой аппроксимации с использованием дополнений по Шуру. При этом трудоемкость операций нахождения крестовой аппрокимации и произведения оценивается как $\mathcal{O}(nr^2 + r^4)$ и $\mathcal{O}(nr^2 + r^4 + rn\log n)$, соответственно, r и n – ранг факторов и размер мод в разложении Таккера. По вычислительной сложности алгоритм уступает только алгоритму вычисления свертки в так называемом квантизованном TT (Quantized TT) формате Севостьянова и Тыртышникова (2009). При этом численные примеры, полученные в диссертации, показывают, что для значений $n \leq 10^3$, $\epsilon = 10^{-5}$ предложенный в диссертации алоритм является более быстродействующим.

Степень обоснованности и достоверность научных положений. Корректность предлагаемых в работе методов подтверждается строгими математическими доказательствами, и обстоятельными численными исследованиями. Она подтверждается также сравнением с результатами расчетов, полученными с помощью известных программных комплексов. Результаты диссертации неоднократно докладывались на международных конференциях и семинарах, а также опубликованы в авторитетных научных изданиях

Научная и практическая значимость заключается в применимости предложенных методов к широкому кругу приложений, а также в наличии открытого программного кода для каждого из предлагаемых методов. Преимущества предлагаемых подходов иллюстрируются на примерах, в частности, на примере расчета молекулы ацетонитрила, для колебательного спектра которой получена точность, превосходящая точность расчетов по другим программам при меньших затратах памяти. Предложенный подход для решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма позволяет с требуемой точностью получать значения энергий орбиталей, описываемых этими уравнениями.

Замечания

1. Качество выбора подпространств T_i в разложении на стр. 28 диссертации $T(x) = T_1(x) + \cdots + T_d(x)$ контролируется в теореме 1.2 лишь предположением о положительной определенности Гессиана $\mathbf{A}$. Отсюда следует, что в малой окрестности неподвижной точки для множителя сходимости имеем $\rho < 1$, а из вида мультипликативного итерационного оператора делается вывод о сходстве метода ALS с методом декомпозиции области (МДО). Но такой же вид имеет итерационный оператор метода Зейделя, который сходится медленно. На самом деле, для МДО существенна не столько мультипликативность оператора перехода (кстати, более популярны как раз схемы с аддитивными итерационными операторами), сколько техника декомпозиции на подпространства, обеспечивающая спектральную эквивалентность МДО-предобусловливателя матрице $\mathbf{A}$ равномерно по размеру h сетки, например, конечноэлементной. Поэтому тезис о сходстве ALS и МДО был бы более содержателен, если бы удалось установить схожесть выбора эффективных подпространств для этих методов.

2. Предлагамые в диссертации алгоритмы нередко характеризуются на основе численных экспериментов как более быстрые и более точные. Например, на стр. 128 читаем, что "предлагаемый подход является одновременно более быстрым и более точным по сравнению с базисным подходом". Не останавливаемся на оценке с точки зрения языка словосочетания "более быстрый подход". В матмоделировании быстродействие по существу понимается как относительное и измеряется временем, затраченным на достижение заданной точности. Поэтому, приведенная фраза не дает представления, какой метод является более быстродейстующим=эффективным. Это же можно сказать о заключении гл. 3, см. 3.7: "Метод превосходит по точности базисный подход, а для класте-

ров с регулярным расположением атомов превосходит базисный подход также по скорости вычислений (сравнение проводилось с программным комплексом GAMESS [37]),"и о других идентичных оценках методов в диссертации.

3. Дифференциальным оператором Юкавы в диссертации называется $-(\Delta+\lambda)$, см. стр.119, хотя на самом деле им является оператор $\Delta - \lambda$. Однако при определении размеров расчетной области $[-L, L]^d$ с однородным краевым условием Дирихле используются свойства правильного потенциала Юкавы. В каком виде использовался потенциал Юкавы в численных примерах гл.3, не ясно.

4. Неравенство на стр. 14, написанное для погрешности скелетного разложения матрицы, следует заменить неравенством для относительной погрешности хотя бы затем, чтобы оно соответствовало пониманию ϵ в последующих теоремах.

5. На стр. 28 вместо $f : \mathbf{V} \to R$ написано $f : \mathbf{V} \to \mathbf{V}$, в формуле после (1.9) пропущено h. В строке над (1.10) написано "дифференцируя уравнение", но дифференцировать уравнение нельзя, тождество – можно.

6. На стр. 70 приведен дифференциальный оператор с потенциалом Хенона-Хейлеса, который содержит отрицательный коэффициент при члене старшего порядка. Отсутствие описания граничных условий краевой задачи и способа дискретизации, а также спектральных свойств данного потенциала, не позволяют обоснованно оценить правильность полученных в данном примере численных результатов.

7. Термин "округление" не кажется удачным, в частности, потому что используется и в случае существенного понижения ранга. Например, О.С. Лебедева в работе 2011 г. использует вместо него "обрезание" и "дожимание". Фразы "представления на неизвестное ядро" на стр. 27, "линейные системы на векторизованное p-е ядро", стр. 34, "ортогонализация на касательное пространство", стр 50, "базируется на фиксированном непересекающемся разделении", стр. 32, "оператором $(A - \Re(x)I)$, спроецированным", стр. 48, "норма спроецированного градиента", стр. 70, представляются жаргонными.

8. С руским языком автор обращается не очень вежливо. Приведем примеры:

радиус, не превосходящий единицы и равен одному, тогда, стр. 30,
формула ... известна, например, из мультипликативного метода, стр. 32.
свертки в виде .... поэлементного произведение, стр. 132
алгоритм ... асимптотически превосходит другие методы, 133,
при расчета кластеров предлагаемые подход, стр. 126,
использовать итерационные метода поиска, стр. 14,
евклидовый градиент, стр. 37,
метод Гаусс-Ньютона , стр. 47,
минимальный натуральный l, стр 51,
проектируем базис ... на касательном пространстве, стр. 50,
На практике не удалось найти практического примера, стр. 53,
комбинация любого числа векторов ... максимум имеет ранг $2r$, стр. 51,
которая является не "сильно хуже" подматрицы, стр. 136,
квантизованом, стр. 133,

Сделанные замечания не являются определяющими при общей положительной оценке представленной диссертации.

Заключение. Автореферат соответствует содержанию диссертации, она является законченным самостоятельным исследованием и полностью соответствует паспорту специальности 01.01.07 "Вычислительная математика".

Диссертация Максима Владимировича Рахубы удовлетворяет требованиям "Положения о порядке присуждения ученых степеней" ВАК, а ее автор заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 - "Вычислительная математика".

Официальный оппонент
Доктор физ.-мат. наук (01.01.07 – "Вычислительная математика"), профессор кафедры параллельных алгоритмов математико-механического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования "Санкт-Петербургский государственный университет"
Адрес организации: 198504, г. Санкт-Петербург, Старый Петергоф, Университетский проспект, дом 28
Телефон: 8 (812) 428-69-44
E-mail: vad.korneev2011@yandex.ru

10.12.2017 **Корнеев Вадим Глебович**

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ
НАЧАЛЬНИК ОТДЕЛА КАДРОВ № 3
Н. И. МАШТЕПА
10.12.2017

Документ подготовлен
в порядке исполнения
трудовых обязанностей