

РЕЦЕНЗИЯ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

доктора физико-математических наук Бориса Николаевича Хоромского
на диссертацию Максима Владимировича Рахубы “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”

Целью диссертационной работы является разработка новых тензорных методов решения многомерных задач на собственные значения, возникающих при дискретизации дифференциальных и интегро-дифференциальных операторов в \mathbb{R}^d . Тензорные методы являются эффективным и многообещающим инструментом для решения краевых задач и задач на собственные значения, встречающихся в современных физических, химических и инженерных задачах. Этот подход позволяет преодолеть или уменьшить влияние “проклятья размерности”, заключающегося в экспоненциальном росте требуемой памяти и вычислительной сложности в зависимости от размерности d . Проклятье размерности без сомнения является основной проблемой при моделировании многомерных задач без использования специальных малопараметрических форматов представления данных.

Актуальность диссертации базируется на интересе к численному решению многомерных задач на собственные значения. Такие задачи возникают в широком круге приложений, включающих, но не ограничивающихся приложениями, связанными с решением уравнения Шредингера, моделированием химических реакций, а также стохастических и многопараметрических задач. Другим примером являются задачи с небольшим или средним числом физических переменных, дискретизованных на мелких сетках, которые могут быть “квантизованы”, то есть рассмотрены как задачи с большим числом “виртуальных” размерностей. Вычисление собственных значений и векторов может быть также использовано для симуляции нестационарных процессов, например, при решении параболических уравнений. В этом случае информация о спектре оператора является важной для предсказания квазистационарных решений.

В качестве приложений автор диссертации рассматривает вычисление колебательного спектра молекул, при моделировании которых возникают размерности от $d = 12$ до $d = 60$. Также решаются уравнения Хартри-Фока и Кона-Шэма в \mathbb{R}^3 , которые широко используются для приближенного вычисления электронного спектра и волновых функций многочастичных систем.

Несмотря на существование используемых на практике тензорных методов решения многомерных задач на собственные значения, в этих методах существует зазор для усовершенствования, так как существующие тензорные методы обычно имеют сильную зависимость от ранга в асимптотической сложности и хорошо известные проблемы с устойчивостью при расчете большого числа собственных значений. Для преодоления этих недостатков в диссертации предлагаются методы, сочетающие в себе классические итерационные методы, а также новый оптимизационный подход, который явным образом учитывает специальную структуру многообразия малоранговых тензоров.

Научная новизна. Разработаны новые методы решения многомерных задач в тензор-

ных форматах. Для линейной задачи на собственные значения разработаны методы, базирующиеся на римановой и попеременной оптимизации. В случае одного собственного значения получено теоретическое обоснование методов. Методы используются для вычисления колебательного спектра молекулы ацетонитрила. Уровни энергии вычисляются более точно при меньших затратах вычислительных ресурсов по сравнению с современными методами, широко использующимися в вычислительной химии.

Задача на собственные значения с нелинейным оператором рассматривается на примере классических уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма. Для этих уравнений предложен полностью сеточный метод. С помощью этого метода возможно вычисление энергий на основе упомянутых уравнений для молекул среднего размера с точностью, контролируемой значением ранга. При этом метод позволяет использовать небольшие объемы компьютерной памяти и способен конкурировать с методом, базирующимся на использовании глобального набора базисных функций.

Практическая и научная значимость. Предложенные методы могут быть использованы в различных приложениях, которые формулируются как задачи на собственные значения с дискретными многомерными операторами (матрицами), и которые допускают малоранговое представление собственных векторов. Такие случаи встречаются при дискретизации дифференциальных операторов, например, в квантовой химии или же когда задача является дискретной с самого начала, как это происходит в физике твердого тела для моделирования цепочек спинов или при решении кинетического уравнения. Представляется интересным развитие предложенных методов в направлении параллельных вычислений, и в применении к расчету сверхбольших задач.

Основное содержание работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав и заключения, общее число страниц 167, включая 19 рисунков и 12 таблиц. Число ссылок на литературу 152.

Во **введении** обсуждается мотивация для рассматриваемой темы исследований, формулируется основная цель диссертации, обосновывается научная ценность и новизна результатов.

В **первой главе** описываются основные тензорные форматы и подходы к решению задач на собственные значения в тензорных форматах. В частности, описываются классический канонический формат, формат Таккера и формат тензорного произведения (ТТ). Приводится описание итерационных методов с округлением по рангу, методов римановой оптимизации, а также ALS подхода. Более того, приводится описание ТТ-представления линейных отображений на многомерных евклидовых пространствах, с помощью которых вводятся вариационные задачи для одного и нескольких минимальных собственных значений.

В теоремах 1.2 и 1.3 сформулированы интересные результаты о локальной сходимости ALS минимизации для определенного класса достаточно гладких функционалов в окрестности неподвижной точки. Проводится аналогия с мультипликативным методом Шварца.

Вторая глава посвящена решению частичной задачи на собственные значения для случая линейного оператора. Методы, разработанные в диссертации включают:

- Обобщение метода Якоби-Дэвидсона с использованием римановой оптимизации на многообразиях тензоров фиксированного ранга. Для регуляризированной версии получены

результаты о сходимости.

- Модификацию обратной итерации, базирующуюся на ALS подходе. Для этой итерации получена теория локальной сходимости.
- LOBPCG метод, базирующийся на нелинейном предобуславливателе, который использует идею ALS подхода.

Методы проверяются на вычислении молекулы ацетонитрила CH_3CN . В этом случае поверхность потенциальной энергии является возмущением поверхности потенциальной энергии гармонического осциллятора. Размерность задачи равнялась $d = 12$, в то время как средний размер мод при использовании псевдоспектральной дискретизации был приблизительно равен $n = 15$. Следовательно, такое представление требует использования приблизительно 15^{12} параметров для каждого собственного вектора, что приводит к невозможности решения такой задачи при хранении данных в полном формате. Точность 80 вычисленных собственных значений проверена на референсном решении, известном в литературе, где наиболее точные результаты были получены с использованием метода разреженных сеток с помощью интерполяционной формулы Смоляка. При ТТ-рангах $r \leq 40$ ошибка вычислений большинства собственных значений находится на крайне удовлетворительном уровне. Примечательно, что некоторые собственные значения с кратностью более одного не были получены в референсном решении, однако были успешно получены с помощью ALS SII метода, предложенного в диссертации.

Другие убедительные численные примеры относились к вычислению колебательного спектра гамильтониана с размерностью вплоть до $d = 60$, полученным, как небольшое возмущение гармонического осциллятора с помощью мономов степени менее или равной двум. В этом случае известны точные собственные значения, а следовательно возможен контроль ошибки решения.

В третьей главе рассматриваются нелинейные уравнения Хартри-Фока и Кона-Шэма. Эти уравнения решаются на всем пространстве \mathbb{R}^3 . Для них предлагается новый метод, базирующийся на итерации Грина и предлагаемой в работе формулы вычисления матрицы Фока без производных. В новом подходе молекулярные орбитали дискретизованы на больших $n \times n \times n$ сетках и затем представлены в формате Таккера. Благодаря возможности варьирования размера сетки и ранга тензоров, возможен контроль точности решения. Автор предлагает эффективную формулу вычисления матрицы Фока без производных, что позволяет использовать простейшие схемы низкого порядка, включая кусочно-постоянные базисные функции.

Заметное преимущество сеточного подхода заключается в возможности использования экстраполяции Ричардсона на последовательности измельчающихся сеток, что может быть просто и естественно реализовано. Это преимущество было использовано и продемонстрировано в численных экспериментах. Более того, многие другие характеристики могут быть легко вычислены без увеличения асимптотической сложности метода. Например, силы (градиенты энергии) могут быть вычислены с помощью хорошо известной формулы Гельмана-Фейнмана, что также было продемонстрировано автором на примере молекулы водорода.

Потенциал в обоих уравнениях включает фиксированную часть взаимодействия с ядрами, а также часть, которая нелинейным образом зависит от всех заполненных орбиталей. Наиболее сложная часть в итерации Грина, относящаяся к вычислению нелинейной части потенциала, делается с использованием эффективного алгоритма крестовой аппроксимации в формате Таккера. Эффективная реализация метода крестовой аппроксимации на MATLAB и Python также предложена автором диссертации.

Численно показано, что предлагаемый метод является конкурентноспособным в сравнении с часто используемым методом, базирующимся на глобальных базисных функциях, для которого известна эффективная реализация в тензорных форматах. Сравнение проведено на примере молекул небольшого размера.

Четвертая глава описывает алгоритм для вычисления наиболее затратной части в гамильтонианах Харгри-Фока и Кона-Шэма – многомерной свертки с ядром Ньютона. Предлагаемый подход отличается от существующих тензорных подходов вычисления многомерных сверток в формате Таккера использованием метода крестовой аппроксимации. Метод крестовой аппроксимации также позволяет эффективно вычислять и другие алгебраические операции с тензорами в малоранговом формате. Линейная сложность алгоритма в зависимости от одномерного размера сетки подтверждается в различных численных экспериментах.

Обоснованность и достоверность научных результатов диссертации подтверждаются использованием строгих математических доказательств и уместным использованием ссылок на другие работы. Более того, предлагаемые методы сравниваются с известными программными комплексами и подходами, опубликованными другими авторами. Также большая часть работы посвящена численным экспериментам, в которых проводится валидация предлагаемых алгоритмов на нетривиальных тестовых примерах, в которых известно аналитическое решение. Новые алгоритмы были также протестированы на расчете реалистичных систем, возникающих в квантовой химии. Численно показано, что предлагаемый cross-conj алгоритм превосходит существующие быстрые тензорные схемы для интересных на практике размеров сеток.

Результаты опубликованы в международных научных журналах, индексируемых Web of Science, а также были представлены на международных научных семинарах и конференциях.

Соответствие паспорту специальности. Содержание работы полностью удовлетворяет требованиям к специальности 01.01.07 – “Вычислительная математика”, так как она содержит разработку новых численных методов решения сложных вычислительных задач, их теоретическое обоснование и приложение к реальным задачам, возникающим в современных физике и химии.

Комментарии и замечания. Диссертация написана понятным языком и легко читается. На докладе, сделанном в Институте математики в науках Общества Макса Планка в Лейпциге продемонстрирован высокий уровень результатов, полученных в диссертации. Автор также показал высокий уровень владения материалом на дискуссиях, возникших при обсуждении диссертации.

По представлению результатов диссертации есть несколько небольших замечаний.

1. В списке литературы ссылки на некоторые литературные источники представлены в

нестандартной форме.

2. В описании малорангового канонического представления ядра Ньютона в §3.4.2, параметр точности $\epsilon > 0$ (в какой норме) и область, в которой приближается функция ядра $1/\|x\|$, не определяются явным образом. Обсуждение скорости сходимости квадратуры в зависимости от числа слагаемых, K_ϵ , могло бы быть расширено ссылками на [47] и [48].
3. Гамильтонианы Хартри-Фока/Кона-Шэма и соответствующие молекулярные орбитали были представлены на достаточно подробных $n \times n \times n$ прямоугольных сетках в вычислительной области $[-L, L]^d$. Более детальное обсуждение ошибки аппроксимации в зависимости от шага сетки $h = 2L/n$ могло бы дать более глубокое понимание перспектив предложенного метода в случае молекул с более сложной геометрией.

Заключение. Замечания, приведенные выше, не уменьшают значимости работы. Диссертация является актуальным, законченным и оригинальным научным трудом. Она написана понятным языком, результаты диссертации являются достоверными. Я считаю, что эта интересная работа является шагом вперед в разработке эффективных тензорных методов для решения задач на собственные значения в больших размерностях.

Таким образом, диссертация удовлетворяет всем требованиям ВАК о присуждении ученых степеней, а ее автор Максим Владимирович Рахуба заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – “Вычислительная математика”.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук (01.01.07 – “Вычислительная математика”), ведущий научный сотрудник Института математики в науках Общества Макса Планка (Max-Planck-Institute für Mathematik in den Naturwissenschaften (MPI MIS)) в Лейпциге

Адрес организации: Инзельштрассе 22-26, 04103 Лейпциг, Германия (Inselstraße 22-26, 04103 Leipzig, Germany)

Телефон: +49 (0) 341-9959-727

Электронная почта: bokh@mis.mpg.de

8 декабря 2017

Борис Николаевич Хоромский

Подпись Хоромского Б. Н. заверяю
(signature of Khoromskij B. N. is certified)
Ученый секретарь MPI MIS
(scientific coordinator of MPI MIS)

Max-Planck-Institut
für Mathematik in den Naturwissenschaften
Inselstrasse 22
04103 Leipzig
Д-р Йорг Ленерт
(Dr. Jörg Lehnert)