

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на диссертационную работу Рахубы Максима Владимировича на тему «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.

М. В. Рахуба поступил в аспирантуру МФТИ в 2014 году после окончания магистратуры МФТИ, где я также был научным руководителем его дипломной работы. В 2017 году он успешно закончил аспирантуру. За время обучения в аспирантуре он проявил себя инициативным и самостоятельным исследователем, способным предлагать новые подходы и проводить их теоретическое обоснование.

Диссертация посвящена построению нескольких приближенных собственных векторов и собственных чисел для многомерных спектральных задач, где приближение собственных векторов строится в малоранговом тензорном формате. Такие задачи возникают в различных приложениях, два из которых рассмотрены в диссертации (вычисление основных колебательных состояний молекул и приближенное решение уравнения Хартри-Фока и Кона-Шэма). Математическая постановка задачи состоит в том, что мы имеем априорную информацию о том, что точное решение лежит близко к некоторому малопараметрическому многообразию. В работе предложены, обоснованы и реализованы новые алгоритмы решения многомерных задач, основанные на использовании предположения о малоранговой структуре решения. В частности, предложен метод нахождения большого числа собственных значений, основанный на построении преобуславливателя для метода Князева. Метод позволил с высокой точностью найти около 100 наименьших собственных значений двух операторов и оказался более эффективным, чем подход, предложенный в группе Т. Каррингтона. Предложен аналог метода Якоби-Давидсона для малорангового многообразия, а также ALS II метод, базирующийся на методе обратной итерации и попеременной оптимизации, для которого получены оценки локальной сходимости. Впервые построен полностью сеточный малоранговый метод приближенного решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, который основан на сочетании нескольких новых подходов, предложенных М. В. Рахубой (новый метод приближенного вычисления свертки, блочная интегральная итерация, вычисления обновления собственных значений без вычисления конечно-разностных аппроксимаций производных). По результатам диссертации опубликованы статьи в SIAM, J. Sci. Comput, J. Comp. Phys, J. Chem. Phys. Результаты работы удостоены почетного диплома на конференции МФТИ в 2016 году, неоднократно докладывались на российских и международных конференциях.

Работа состоит из введения, 4 глав и заключения. Объем работы составляет более 160 страниц. В работе последовательно описываются предложенные подходы, приводятся основные алгоритмы, а также их теоретическое обоснование. Результаты работы оригинальные и принадлежат автору.

Считаю, что диссертация Рахубы Максима Владимировича «Тензорные методы решения многомерных частичных задач на собственные значения», удовлетворяет всем требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.01.07 — «Вычислительная математика», а её автор заслуживает присуждения искомой степени.

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., доцент
Сколковского института науки и технологий



И.В. Оселедец

Сергей Оселедец И.В. подтвердил

*Руководитель отдела
искусственного интеллекта*



И.В. Оселедец И.В.