

УТВЕРЖДАЮ
Проректор по научной деятельности
федерального государственного
автономного образовательного учреждения
высшего образования
«Казанский (Приволжский)
Федеральный университет»,
Д.т.-м. н., профессор
Нургалиев Д.К.



«10» ноября 2017 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

на диссертационную работу Рахубы Максима Владимировича «Тензорные методы решения многомерных частных задач на собственные значения», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – Вычислительная математика

1. Актуальность темы диссертации

В диссертационной работе Рахубы Максима Владимировича предлагаются новые методы решения многомерных задач на собственные значения. Основное предположение, используемое в работе, заключается в возможности представления решения рассматриваемых задач небольшим числом параметров с помощью подхода тензорных разложений. В качестве приложений рассматриваются расчет колебательного спектра молекул с помощью уравнения Шредингера и решение уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, возникающих при расчете электронного спектра атомов и молекул. Для рассматриваемых методов приводится строгое математическое исследование, а также проводятся подробные верификационные расчеты и сравнение с существующими подходами.

Актуальность темы исследований диссертационной работы не вызывает сомнений. Многомерные задачи на собственные значения возникают в широком круге приложений, в частности, в физике твердого тела и квантовой химии, где

необходимо решать модификации уравнения Шредингера. Сложность решения таких задач заключается в том, что при работе с многомерными массивами возникает проблема экспоненциального роста памяти для их хранения. В результате, без использования дополнительных предположений о рассматриваемых массивах, работа с ними невозможна даже на современных суперкомпьютерах. В свою очередь, тензорные разложения показали эффективность для представления решений многомерных задач в широком круге приложений. Однако поиск этих решений в тензорных форматах является нетривиальной задачей. Поэтому разработка новых эффективных тензорных алгоритмов является актуальной и практически важной темой исследований.

2. Структура и основные результаты диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы, содержащего 152 источника. Общий объем диссертации составляет 167 страниц.

Во введении кратко излагается актуальность проблемы, формулируется цель и практическая ценность работы, а также описывается структура и основное содержание работы. Дается краткий обзор научной литературы, посвященный данной проблеме.

В первой главе приводится описание используемых в диссертационной работе тензорных разложений. Ставится задача о поиске собственных значений в тензорных форматах. Для подхода попеременной оптимизации приводится новая теория локальной сходимости.

Вторая глава посвящена методам решения многомерных задач на собственные значения с линейным оператором и является наиболее объемной частью диссертации. В главе приводится несколько новых методов. А именно, для поиска одного собственного значения предлагается обобщение метода Якоби-Дэвидсона. Формулируется теория сходимости этого метода, а также проводится подробное численное сравнение с альтернативными подходами. Рассматривается обобщение обратной итерации и приводятся оценки локальной сходимости. Предлагается метод для поиска нескольких собственных значений. На примере расчета спектра молекулы ацетонитрила показывается преимущество предлагаемых методов по сравнению с методом, предложенным в группе профессора Т. Каррингтона, являющимся одним из ведущих ученых в области вычислительной квантовой химии.

В третьей главе предлагается новый метод для решения задачи на собственные значения с нелинейным оператором на примере уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма. Приводится подробное сравнение предлагаемого подхода и существующих программных комплексов для решения упомянутых уравнений.

В четвертой главе рассматривается новый быстрый метод вычисления многомерной свертки в тензорных форматах, которая возникает при решении уравнений из третьей главы.

В заключении сформулированы основные результаты выполненной работы.

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Для поиска целевого собственного значения предложено обобщение JD-метода при ограничении на тензорный ранг решения. Изучены свойства возникающих в этом методе систем линейных уравнений. Показана сходимость регуляризованного метода. Из полученных уравнений для предложенного JD-метода получено обобщение метода обратной итерации в малоранговом случае. Показаны преимущества метода в случае, когда возникающие линейные системы решаются неточно.

2. Предложен ALSII-метод, базирующийся на ALS-подходе и методе обратной итерации. Получен результат о локальной сходимости метода через сходимость ALS-итерации для минимизации отношения Рэлея. Для ALS-оптимизации получена новая теория сходимости, явно показывающая связь с мультипликативным методом Шварца.

3. Предложена концепция преобуславливания на многообразии для поиска нескольких собственных значений, примененная к методу LOBPCG. С помощью предложенных итераций с высокой точностью рассчитан спектр молекулы ацетонитрила. Показано, что предлагаемый метод превосходит по точности экономии памяти существующие аналоги для расчета колебательного спектра.

4. Рассмотрена задача на собственные значения с нелинейными операторами, возникающими в уравнениях Хартри-Фока и Кона-Шэма. Предложен метод, базирующийся на разложении Таккера, сложность которого линейно зависит от размера сетки по каждому направлению. Проведен точный расчет ряда атомов, молекул и кластеров. Получены результаты, превышающие по точности подход, использующий глобальные базисные функции. Для кластеров с регулярным расположением атомов/молекул предложенный метод является более быстрым, чем базисный подход.

5. Для быстрого вычисления многомерной свертки предлагается cross-conv алгоритм, базирующийся на методе крестовой аппроксимации. Показано, что для размеров сетки, интересных на практике, cross-conv алгоритм превосходит по скорости существующие аналоги.

Содержание работы полностью соответствует паспорту специальности 01.01.07 «Вычислительная математика», так как в работе разрабатываются новые алгоритмы для решения задач математической физики, рассматриваются

вопросы эффективной реализации на ЭВМ, а также приводится теория сходимости предлагаемых методов.

3. Новизна, достоверность и обоснованность научных положений, выводов и рекомендаций

Все результаты, полученные в работе, являются новыми. В частности, предлагаются новые методы решения задачи на собственные значения. Для большинства предложенных методов исследуются вопросы их сходимости.

Обоснованность и достоверность результатов работы подтверждается использованием строгих математических выводов, наличием большого количества численных экспериментов, а также апробацией работы на международных и российских научных конференциях и семинарах. Содержание работы опубликовано в десяти печатных изданиях, из которых три статьи опубликованы в ведущих в своей области международных журналах, индексируемых Web of Science.

4. Значимость полученных результатов и рекомендации по их использованию

Многомерные задачи на собственные значения возникают в основном в приложениях, связанных с решением уравнения Шредингера. Можно отметить расчет спектра спиновых систем в физике твердого тела, а также расчет колебательного и электронного спектров атомов и молекул. Однако применение предлагаемых подходов не ограничиваются только упомянутыми многомерными задачами. В диссертационной работе также отмечается возможность использовать подход квантизации, при котором даже задачи с малым количеством физических переменных можно представить в виде многомерных, и использовать разработанные методы.

Все сказанное выше в совокупности позволяет классифицировать диссертацию Рахубы Максима Владимировича как законченное научное исследование, являющееся важным вкладом в современную вычислительную математику.

Результаты работы могут использоваться специалистами Казанского (Приволжского) федерального университета, Института Прикладной математики РАН ИМ. М.В.Келдыша, Московского государственного университета им. М.В.Ломоносова, Санкт-Петербургского государственного университета, Московского физико-технического института (государственного университета) и других профильных вузов.

5. Замечания

1. В работе сразу предполагается, что решение рассматриваемых задач может быть представлено с помощью небольшого числа параметров в тензорных форматах. Теоретический анализ этого предположения отсутствует и подтверждается только численными экспериментами.

2. Для теории функционала плотности используется только один вид обменно-корреляционного функционала. Следовало бы исследовать поведение метода и для других функционалов, например, учитывающих градиенты плотности.

3. На странице 96 утверждение «ТТ-ранг такого осциллятора равен 3 и не зависит от d или n » возникает без какого-либо обоснования или ссылки на литературу.

4. Имеется ряд орфографических и стилистических ошибок.

6. Заключение

Указанные замечания не оказывают влияние на общую положительную оценку диссертации. Научный уровень данной работы достаточно высок, работа вносит значимый вклад в развитие методов решения многомерных частичных задач на собственные значения. Основные результаты работы получены впервые и лично автором. Основные положения диссертации прошли широкую апробацию на научных семинарах, всероссийских и международных конференциях и опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК РФ.

Автореферат диссертации полностью соответствует содержанию диссертации. Сама диссертация изложена стилистически грамотно и правильно оформлена.

Диссертационная работа Рахубы Максима Владимировича «Тензорные методы решения многомерных частичных задач на собственные значения» выполнена на высоком научном уровне, является самостоятельной и законченной научно-квалификационной работой, а также отвечает требованиям ВАК Российской Федерации, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности по специальности 01.01.07 – «Вычислительная математика», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 года, а её автор, Рахуба Максим Владимирович несомненно, заслуживает присуждения ему указанной степени.

Настоящий отзыв и диссертационная работы Рахубы Максима Владимировича обсуждены и одобрены на заседании кафедры вычислительной

математики отделения прикладной математики и информатики Института вычислительной математики и информационных технологий Казанского (Приволжского) федерального университета «09» ноября 2017 г., протокол № 3.

Профессор
кафедры вычислительной математики КФУ,
доктор физико-математических наук,
член-корреспондент
Академии наук Республики Татарстан



Ильдар Бурханович Бадриев

420008, г. Казань, ул. Кремлевская, 18,
Кафедра вычислительной математики
отделения прикладной математики и информатики
Института вычислительной математики
и информационных технологий
Казанского (Приволжского) федерального университета,
Телефон/факс +7 (843) 233-70-42,
Web-сайт организации: <https://kpfu.ru>
e-mail Idar.Badriev@kpfu.ru

«09» ноября 2017 г.

