

ОТЗЫВ

официального оппонента, кандидата физико-математических наук Рахубы Максима Владимировича на диссертационную работу Желткова Дмитрия Александровича «Методы аппроксимации и оптимизации на основе тензорных поездов и их приложения», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Тема исследования и ее актуальность. С ростом количества доступных данных и увеличения мощности вычислительных ресурсов в современном мире возникает потребность в решении все более многомерных задач. Такие задачи могут заключаться, например, в поиске глобального оптимума функции от большого числа непрерывных или дискретных переменных, решении многомерных дифференциальных уравнений в частных производных или в некоторой обработке данных, представленных в виде многомерных массивов. Все эти задачи являются крайне ресурсоемкими из-за так называемого проклятия размерности, заключающегося в экспоненциальном росте числа элементов массивов в зависимости от их размерности.

Одним из современных способов преодоления проклятия размерности является разложение тензорного поезда (ТТ разложение). Однако, даже если заранее известно, что тензор может быть приближен в виде ТТ разложения с небольшим числом параметров, эффективный поиск этого разложения может оказаться нетривиальной задачей: разложение необходимо строить по небольшому числу элементов из-за невозможности хранить все элементы массива одновременно. Более того, вычисление каждого отдельного элемента

тензора может требовать решения какой-то отдельной ресурсоемкой задачи, например, системы дифференциальных уравнений.

Для преодоления этой проблемы в диссертации представлен новый параллельный алгоритм построения ТТ разложения. Алгоритм базируется на идее метода крестовой интерполяции и позволяет строить малоранговое ТТ приближение по небольшому числу адаптивно выбираемых элементов. В диссертации также делается важное наблюдение о том, что крестовый метод находит большие по абсолютному значению элементы. На основании этого замечания предлагается новый параллельный алгоритм решения другой актуальной задачи: поиска глобального оптимума функции многих переменных. Из-за возможного наличия большого числа локальных оптимумов, глобальная оптимизация невыпуклых функций до сих пор представляет значительные трудности, а развитие новых эффективных подходов, которые возможно масштабировать на большое число вычислительных узлов, является актуальной задачей.

Структура и содержание диссертации. Во *введении* обосновывается актуальность темы исследования, описываются цели и задачи диссертации.

Первая глава посвящена методу крестовой интерполяции для многомерных массивов, который позволяет строить приближение в формате тензорного произведения с помощью небольшого числа элементов тензора. В этой главе сначала приводится параллельная версия метода крестовой аппроксимации для матриц, которая затем обобщается на случай многомерных массивов и ТТ разложения. Важной особенностью предлагаемого метода является адаптивный подбор ранга разложения в процессе вычислений, так как значения рангов, как правило, заранее неизвестно. В секции с экспериментами исследуется численное поведение предлагаемого алгоритма на большом количестве тестовых примеров.

Во *второй главе* обсуждается важное свойство крестового метода – способность обнаруживать большие по абсолютному значению элементы.

Для случая матриц ранга 1 доказываются теоремы об оптимизационных свойствах крестового метода.

В *третьей главе* описан новый метод глобальной оптимизации функции многих переменных на основе ТТ разложения и метода крестовой интерполяции. В частности, на достаточно мелкой сетки функция представляется в виде многомерного массива, для которого затем ищется максимальное значение элемента. В основе метода лежит предположение о том, что метод крестовой аппроксимации выбирает большие по модулю элементы, и что для частного случая матриц ранга 1 обосновывается во второй главе. Также в третьей главе предлагается параллельная версия предлагаемого алгоритма оптимизации.

Четвертая глава посвящена применению алгоритма глобальной оптимизации из третьей главы к задаче докинга, где требуется найти минимальное значение потенциальной энергии системы белок-лиганд. Проводятся численные расчеты для двух типов систем: для жесткого белка, что приводит к общему числу степеней свободы от 6 до 25, и для белка с подвижными атомами, что приводит к задачам со значительно большим числом степеней свободы. В случае жесткого белка проведено сравнение предложенного алгоритма с методом FLM, использующего метод Монте-Карло. Показано, что FLM находит более низкие значения функционала энергии. Однако предлагаемый метод показывает свою перспективность для поиска положений лиганда, близких к нативному. В случае с подвижным белком приводятся эксперименты для нескольких комплексов. В большинстве случаев с помощью предлагаемого метода удается найти минимумы энергии, расположенные близко к оптимизированному нативному положению. В случае задачи с 157 степенями свободы расчет соответствующей системы белок-лиганд был произведен впервые.

В *пятой главе* рассматривается параметрическое семейство дифференциальных уравнений, моделирующих иммунологические процессы.

Задача заключается в поиске параметров, минимизирующих некоторый функционал, описывающий близость модели к наблюдаемым данным. Предлагаемый в диссертации метод глобальной оптимизации сравнивается с 7 альтернативными методами оптимизации. Во всех рассмотренных экспериментах предлагаемый метод показывает один из лучших результатов.

В *шестой главе* предлагаемый алгоритм глобальной оптимизации применяется к задаче построения антенных решеток в автомобильных радарх. В численных экспериментах рассматривается минимизация двух разных функционалов на нескольких конфигурациях антенн. Работа метода сравнивается с конфигурациями антенн у референсного радара.

В *заключении* описываются основные результаты работы.

Научная новизна. В диссертации представлен новый метод крестовой интерполяции в ТТ формате. На основе крестового метода предлагается новый метод глобальной оптимизации. Для обоих методов разработана параллельная версия. Для метода глобальной оптимизации в случае матриц ранга 1 получены новые теоретические оценки.

Практическая ценность работы. Работа безусловно представляет практическую и научную ценность. Все предлагаемые в диссертации методы эффективно реализованы на языках C/C++, а также распараллелены с помощью MPI, что позволяет применять их для задач высокой размерности. Разработанные методы доступны в виде библиотеки с открытым доступом. Они будут полезны как специалистам по тензорным методам, так и специалистам широкого профиля, заинтересованных в решении задачи глобальной оптимизации для различных функций.

Достоверность и обоснованность научных положений и выводов не вызывает сомнений. Для всех использованных методов приводится подробное численное сравнение с альтернативными известными подходами. Для случая матриц ранга 1 приводится строгое математическое обоснование работы метода. Достоверность результатов также подтверждается значительным числом публикаций в рецензируемых изданиях: основные

результаты работы опубликованы в 16 публикациях в изданиях, рекомендованных ВАК. При этом 13 из них опубликовано в научных журналах, также индексируемых базами Scopus или Web of Science.

Замечания по работе:

1. В предлагаемых алгоритмах крестовой аппроксимации и глобальной оптимизации не накладывается условий на то, чтобы каждый элемент выбирался только один раз. Поэтому кажется целесообразным сохранять значения полученных в тензоре элементов. В диссертации этот вопрос не обсуждается.

2. В таблицах 9-13 отсутствует размерность у времени расчетов. При этом в некоторых из таблиц дополнительно указано, что «время вычислений увеличено в 100 раз», что может ввести читателя в дополнительное заблуждение.

3. В примере с использованием крестовой интерполяции для задачи интегрирования функции (секция 1.6.3) выбрана функция, имеющая точный малый ТТ ранг. То есть у метода крестовой интерполяции появляется преимущество по сравнению с методом квази-Монте-Карло.

4. Диссертация содержит некоторое количество опечаток в тексте и в формулах. Приведем несколько примеров:

стр. 57: размеры A и B имеют некорректное форматирование;

стр. 58: «соответствующих наилучшие найденные значения»

стр 76: в формуле для функции g не закрыт знак модуля.

5. Один из главных результатов диссертации – метод глобальной оптимизации описан достаточно кратко: всего на 6 страницах. В итоге метод может быть сложно полноценно понять неспециалисту в области тензорных разложений.

6. Предложенный в работе метод глобальной оптимизации подробно сравнивается с другими подходами на нескольких сложных вычислительных задачах. На всех примерах метод показывает корректность работы и часто опережает альтернативные подходы по различным метрикам. Однако в диссертации полностью отсутствуют вычисления на стандартных примерах многомерных функций с заранее известными значениями глобального оптимума.

7. Выбор нелинейной функции в предлагаемом методе глобальной интерполяции обсуждается в диссертации очень кратко. Было бы, например, интересно понять, что мотивировало использовать нелинейную функцию из уравнения (4.1), имеющую достаточно нетривиальный вид.

8. Таблица 15 на стр. 65 выходит за рамки страницы.

9. В текущих экспериментах метод SOL-P работает быстрее метода FLM (глава 4), но при этом находит состояния с большей энергией. Было бы интересно сравнить эти методы при сравнимом времени их работы, например, с помощью увеличения числа узлов сетки в случае SOL-P.

10. Отсутствует таблица, аналогичная таблице 18 (стр. 77) для значений функционала g .

Общая оценка работы. Указанные замечания носят частный характер и не снижают ценности работы. Диссертация посвящена решению актуальной задачи, а ее результаты безусловно имеют практическую и научную значимость. Считаю, что диссертация выполнена на высоком научном уровне, а ее результаты являются новыми и представляют научную ценность.

Автореферат соответствует содержанию диссертации.

Диссертационная работа удовлетворяет требованиям пунктов 9-11, 13 и 14 Положения о присуждении учёных степеней, а её автор Желтков Дмитрий Александрович заслуживает присуждения учёной степени кандидата

физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент

кандидат физико-математических наук,
доцент департамента больших данных и информационного поиска,
факультет компьютерных наук
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

Рахуба Максим Владимирович

М.В. Рахуба 01.06.22

Контактные данные:

тел.: +7 (495) 531-00-00 доб. 28116, e-mail: mrakhuba@hse.ru
Специальность, по которой официальным оппонентом защищена
диссертация: 01.01.07 — «Вычислительная математика»

Адрес места работы:

109028, Покровский бульвар, д.11, Москва, Россия,
ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики», факультет компьютерных наук
Тел.: +7 (495) 531-00-00 доб. 28116, e-mail: mrakhuba@hse.ru

Подпись сотрудника НИУ ВШЭ
М.В. Рахубы удостоверяю

СПЕЦИАЛИСТ ПО ПЕРСОНАЛУ

Управления Персонала
ПРОКОПЕНКО А.И.

01.06.2022

