

## ОТЗЫВ

**официального оппонента доктора физико-математических наук Жукова Виктора Тимофеевича на диссертацию 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**

Многомерные задачи оптимизации функционалов являются широко распространёнными в практике вычислений. Трудности решения таких задач хорошо видны на примере задачи поиска минимума вещественной функции многих переменных. Несмотря на наличие различных алгоритмов приближенной минимизации, проблему в целом нельзя признать решенной. В особенности это относится к задачам большой размерности, в которых число переменных может достигать сотен и даже тысяч, а оптимизируемые функции оказываются невыпуклыми и обладают большим числом локальных экстремумов.

Поэтому научная задача разработки методов аппроксимации и оптимизации функции многих переменных, поставленная в диссертации, лежит на важном направлении развития математического моделирования, методов вычислений и современного программирования. Предпосылками для неуклонного расширения работ данного направления являются, с одной стороны, развитие вычислительной техники с усложнением суперкомпьютерных архитектур, а с другой – все возрастающая роль вычислительного эксперимента в научных исследованиях. По мере расширения сферы применения численного моделирования и возрастания его возможностей, возрастают сложность и масштабность задач. Поэтому возможности численных методов зачастую оказываются недостаточными, и требуется их радикальное усовершенствование. В этом отношении результаты, содержащиеся в диссертации Желткова Д.А., несомненно, представляются инновационными, важными и **актуальными**.

**Актуальность темы** диссертационного исследования не вызывает сомнения и хорошо раскрыта в автореферате и диссертации, где также детально формулируется цель и приводится обоснование основных положений и достижений исследования.

Автором развита новая вычислительная методика, включающая следующие достижения.

1. Метод глобальной оптимизации на основе тензорных поездов (ТТ-формат). Этот формат служит для компактного хранения данных и в этом формате существуют быстрые операции над тензорами. Метод предназначен для поиска глобального экстремума сложных функций и предполагает наличие в оптимизируемой функции малопараметрической структуры

специального вида, т.е. подразумевается возможность приближения тензора большого ранга  $d$  тензорами малого тензорного ранга.

2. Оригинальный способ адаптивного поиска ранга для ТТ-крестового метода (как обобщение матричного крестового метода с адаптивным выбором ранга). При прозрачной матричной схеме, в которой при известном малом ранге  $r$  матрицы можно точно восстановить ее по  $r$  столбцам и  $r$  строкам, процедура адаптивного поиска тензорного ранга для ТТ-крестового метода не является очевидной и требует подтверждения надежности с помощью вычислительных экспериментов.

3. Создание последовательного и параллельного кодов глобальной оптимизации на основе ТТ разложения. Все алгоритмы, включая крестовые методы для матриц и тензоров, реализованы в виде библиотеки на языке C++ с использованием технологий параллельного программирования MPI и OpenMP и доступны для свободного использования.

4. Верификация численной методики. В работе проведены вычислительные эксперименты для тестирования надёжности предложенной стратегии выбора ТТ-крестового метода.

5. Численное моделирование на основе метода глобальной оптимизации в практических задачах: моделирование белковых структур, идентификация параметров моделей ВИЧ-инфекции, оптимизация конфигурации антенн автомобильных радаров.

Каждый из пяти указанных пунктов содержит новые оригинальные элементы.

#### **Научная новизна.**

Благодаря оригинальным идеям и фундаментальной математической подготовке, поставленные в диссертации задачи решены на высоком научном уровне, что позволило достичь существенного продвижения в развитии численных методов минимизации функций многих переменных на основе тензорных разложений. Разработанный математический аппарат применен для создания численных моделей и компьютерных кодов, и они использованы для решения сложных прикладных задач моделирования белковых структур, ВИЧ-инфекции, конфигурации антенн автомобильных радаров

#### **Практическая ценность результатов диссертации.**

Диссертантом построены новые численные методы, доведенные до эффективной компьютерной реализации. Создана открытая библиотека параллельных методов крестовой интерполяции и глобальной оптимизации на основе тензорных разложений. Решены важные для приложений задачи моделирования белковых структур, ВИЧ-инфекции, конфигурации антенн автомобильных радаров. Впервые произведен расчёт белкового комплекса с большим числом степеней свободы. Эта задача является одной из ключевых задач применения компьютерного моделирования для разработки новых лекарственных средств.

### **Анализ содержания работы.**

Диссертационная работа написана по традиционному плану, изложена лаконично, на 94 страницах, и состоит из введения, 6 глав, заключения и 1 приложения. Список литературы содержит 53 наименования.

Во **введении** кратко, но ёмко, сформулированы актуальность, основные задачи, научная новизна и практическая значимость работы, приводится обзор конкурентных методов и научной литературы по изучаемой проблеме.

В **главе 1** рассматриваются методы крестовой интерполяции матриц и тензоров. Такие методы позволяют выполнять аппроксимацию матриц и тензоров, используя лишь небольшое число их элементов. В случае матриц больших размеров аппроксимация может занимать существенное время, поэтому для ускорения расчетов построен параллельный алгоритм. В этой же главе проведено тестирование надежности ТТ–крестового метода на модельных задачах.

В **главе 2** приведено исследование оптимизационных свойств матричного крестового метода. В этом случае крестовый алгоритм в итерациях строит приближение к заданной матрице. Предваряемая леммами, доказана теорема в обоснование метода при некоторых допущениях.

В **главе 3** дано детальное описание построенного метода глобальной оптимизации на основе разложения в тензорный поезд и приведена оценка сложности метода. В этой же главе представлен последовательный алгоритм и его параллельная версия.

В **главе 4** приведено описание численных экспериментов по применению метода глобальной оптимизации на основе разложения в тензорный поезд к задаче расчета энергии связывания белка-мишени и органической молекулы (лиганда). Эта задача является одной из ключевых задач применения компьютерного молекулярного моделирования для разработки новых лекарственных средств. В главе детально демонстрируется работоспособность и эффективность параллельного алгоритма. Расчёт комплекса белок-лиганд с большим числом степеней свободы (157) произведён впервые.

В **главе 5** алгоритм глобальной оптимизации применен к задаче идентификации параметров моделей ВИЧ-инфекции. Подобные модели характерны тем, что ряд параметров модели невозможно измерить непосредственно. Поэтому для поиска нужных параметров применяют методы глобальной оптимизации, используя в качестве оптимизируемого функционала близость предсказываемых моделью измеримых величин к клиническим данным. Д.А. Желтков показал эффективность разработанного метода в сравнении с семью различными методами глобальной оптимизации.

В главе 6 рассмотрена задача распознавания объектов с помощью автомобильных радаров, эффективное и надежное решение которой необходимо для разработки беспилотных автомобилей. Точность и однозначность определения нахождения объектов зависит от расположения антенных элементов на радаре. Для оптимизации функционалов позиций антенн успешно использован предложенный в диссертации метод глобальной оптимизации на основе ГТ-разложения.

В очень кратком **заклучении** приведены основные результаты работы.

Работа хорошо структурирована; последовательность изложения материала создает целостное представление о развитии теории, методов и личного вклада соискателя. Распределение материала по главам выглядит вполне соразмерным. Оформление диссертации соответствует требованиям ВАК.

#### **Публикации и апробация.**

Основные результаты по теме диссертации изложены в достаточном числе публикаций: в 16 печатных изданиях, удовлетворяющих требованиям ВАК. Зарегистрирована 1 программа для ЭВМ. Основные результаты докладывались более чем на десяти российских и международных конференциях.

**Высокая степень достоверности результатов работы** подтверждена корректностью использованного математического аппарата, серией проведенных расчетов. Список публикаций и активное участие диссертанта в научных конференциях свидетельствуют о том, что научная общественность хорошо ознакомлена с результатами диссертации.

Автореферат диссертации и публикации отражают основное содержание работы.

#### **Замечания по работе.**

1. Работа очень лаконична. Полученные результаты численных экспериментов и моделирования произвели бы более яркое впечатление при наличии их лучшего комментирования.

2. В диссертации говорится, что все алгоритмы реализованы в виде библиотеки на языке C++ и доступны для свободного использования. Однако свободный доступ предполагает наличие ссылки, по которой библиотека может быть скачана для использования. Не указано также, что можно получить: исходные коды или исполняемые файлы.

**Общая оценка работы.** Приведенные замечания относятся к форме представления результатов и не снижают общей ценности диссертационной работы. Представленная работа выполнена на высоком научном уровне, является самостоятельным и завершённым исследованием в области математического моделирования, численных методов и комплексов программ. Автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации. Автор

демонстрирует глубокое понимание математической теории, численных методов и программирования.

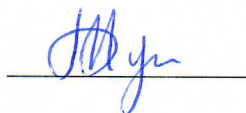
Диссертационная работа соответствует всем требованиям пунктов 9-11, 13, 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ от 24 сентября 2013 года № 842, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор Желтков Дмитрий Александрович заслуживает присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 - математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

**Официальный оппонент:**

Главный научный сотрудник, и.о. зав. отделом «Прикладные задачи механики сплошных сред» Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики имени М.В. Келдыша Российской академии наук»,

докторская диссертация защищена по специальности 05.13.18 – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ,

доктор физико-математических наук



Виктор Тимофеевич Жуков

«02» июля 2022 г.

Россия, 125047, Москва, Миусская площадь, д.4., тел.: +7(499) 978-13-14, факс: +7(499)972-07-37 эл. почта: [office@keldysh.ru](mailto:office@keldysh.ru), Web-сайт организации: <http://www.keldysh.ru/>

Подпись Виктора Тимофеевича Жукова заверяю

Учёный секретарь ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

кандидат физ.-мат. наук



/А.А. Давыдов/

«02» июля 2022 г.