

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
ИНСТИТУТ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И  
МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ГЕОФИЗИКИ  
СИБИРСКОГО ОТДЕЛЕНИЯ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК  
(ИВМиМГ СО РАН)

Просп. Академика Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090  
Тел.: (383)330-83-53, факс (383)330-87-83, e-mail: director@sscc.ru  
ОКПО 03533843, ОГРН 1025403656420, ИНН/КПП 5408100025/540801001

02.06.2022 № 15301/1-25-07  
На № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

УТВЕРЖДАЮ  
Директор Федерального государственного  
бюджетного учреждения науки  
«Институт вычислительной математики и  
математической геофизики  
Сибирского отделения Российской академии наук»  
д. ф.-м. н., профессор РАН  
М. А. Марченко  
« \_\_\_\_\_ 2022 г.



**ОТЗЫВ**

ведущей организации 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.

Различные задачи задач прикладной математики сводятся к многомерной оптимизации. Одна из трудностей решения подобных задач – большое число локальных минимумов. Поэтому задача создания, обоснования и параллельной реализации методов глобальной оптимизации является актуальной.

**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 аппроксимации и оптимизации на основе ТТ представления. ТТ 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 малоранговой аппроксимации.

2. Оригинальный способ адаптивного поиска ранга для ТТ-крестового метода (как обобщение матричного крестового метода с адаптивным выбором ранга). Процедура адаптивного поиска тензорного ранга для ТТ-крестового метода требует подтверждения надежности с помощью вычислительных экспериментов и не является очевидной.

3. Реализация метода глобальной оптимизации на основе ТТ разложения. Все алгоритмы 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. Апробация разработанного метода глобальной оптимизации на моделировании белковых структур, идентификации параметров моделей ВИЧ-инфекции, оптимизации 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 поездов. 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 библиотеки параллельных методов крестовой интерполяции и глобальной оптимизации на основе тензорных поездов. 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 изложена на 94 страницах, и состоит из введения, 6 глав, заключения и 1 приложения. Список литературы содержит 53 наименования.

Во **введении** кратко 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 обоснования 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.

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 ТТ-разложения.

В заключении приведены основные результаты работы.

Работа хорошо структурирована; последовательность изложения материала создает целостное представление о развитии теории, методов и личного вклада соискателя.

#### **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. На наш взгляд стоило бы несколько более подробно уточнить связь между числом обусловленности матрицы и ее малоранговой аппроксимацией.
2. В задачах восстановления параметров предварительно можно проводить анализ идентифицируемости и определить какие параметры (либо функция от этих параметров) восстанавливаются однозначно, а также проводят анализ чувствительности и определяют, как изменение параметров влияют на данные задачи. Данное замечание носит скорее рекомендательный характер для будущих исследований по данному направлению.

Редакционные замечания.

3. В работе используются обозначения, которые хорошо известны специалистам по тензорному разложению, но которые, тем не менее, хорошо было бы определить в самом начале текста. Например, на странице 5 (7 строка снизу) автореферата

появляется обозначение  $r$ , которое при дальнейшем прочтении становится понятно, что это ранг матрицы.

4. В тексте диссертации появляются разные термины: «аппроксимации и оптимизации на основе ТТ поездов», «метод глобальной оптимизации на основе тензорного ТТ-представления», «метод на основе ТТ-разложения тензоров», «метод глобальной оптимизации на основе разложения в тензорный поезд», «метод глобальной оптимизации на основе ТТ-разложения». На наш взгляд, если и использовать такое количество терминов, то стоило бы пояснить, чем вызвано такое описание.

**Общая оценка работы.** Приведенные замечания 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 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.**

Диссертационная работа Желткова Д.А. «Методы аппроксимации и оптимизации на основе тензорных поездов и их приложения» заслушана и обсуждена на научном семинаре лаборатории обратных задач естествознания Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН 11 мая 2022 года. В работе семинара приняли участие 12 человек, в том числе 4 докторов наук, 2 кандидата наук. Отзыв одобрен в качестве отзыва ведущей организации, протокол № 1; результаты голосования: «за» – 12, «против» – нет, воздержавшихся нет.

Отзыв подготовили доктор физико-математических наук Кабанихин Сергей Игоревич, главный научный сотрудник Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, и Шишленин Максим Александрович, заведующий лабораторией обратных задач естествознания Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН.

Я, Шишленин Максим Александрович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Заведующий лабораторией  
обратных задач естествознания,  
д.ф.-м.н.



Шишленин Максим Александрович

(тел. 8(383)330-61-67; адрес 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 6;  
e-mail: maxim.shishlenin@sscc.ru)

Подпись Шишленина Максима Александровича заверяю  
Ученый секретарь ИВМиМГ СО РАН,  
к. ф.-м. н.



Вшивкова Людмила Витальевна

12.05.2022

Я, Кабанихин Сергей Игоревич, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Главный научный сотрудник  
лаборатории обратных задач естествознания  
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН, профессор



Кабанихин Сергей Игоревич

(тел. 8(383)330-61-67; адрес 630090, г. Новосибирск, пр. Ак. Лаврентьева, 6;  
e-mail: ksi52@mail.ru)

Подпись Кабанихина Сергея Игоревича заверяю  
Ученый секретарь ИВМиМГ СО РАН,  
к. ф.-м. н.



Вшивкова Людмила Витальевна

12.05.2022

**Сведения о ведущей организации:**

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук (ИВМиМГ СО РАН)

630090, г. Новосибирск, пр-т Академика Лаврентьева, 6;  
+7 (383) 330 83 53; director@sscc.ru; icmmg.nsc.ru