

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.455.01,
СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО
БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ИНСТИТУТА
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ ИМЕНИ Г. И. МАРЧУКА
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ
УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____.

решение диссертационного совета от 20.06.2022 г. № 7

о присуждении Желткову Дмитрию Александровичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Методы аппроксимации и оптимизации на основе тензорных поездов и их приложения» по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» принята к защите 13 апреля 2022 г., протокол № 4, диссертационным советом 24.1.455.01, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института вычислительной математики имени Г.И. Марчука Российской академии наук (ИВМ РАН), расположенного по адресу 119333, г. Москва, ул. Губкина, д. 8, приказ о создании диссертационного совета № 1356/нк от 15.12.2021.

Соискатель Желтков Дмитрий Александрович, 1990 года рождения, в 2012 году окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», в 2012–2015 гг. обучался в очной аспирантуре в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова», в настоящее время работает в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Института вычислительной математики им. Г.И. Марчука Российской академии наук в должности младшего научного сотрудника.

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте вычислительной математики имени Г.И. Марчука Российской академии наук.

Научный руководитель – академик РАН, доктор физико-математических наук, профессор **Тыртышников Евгений Евгеньевич**, директор ИВМ РАН.

Официальные оппоненты:

Жуков Виктор Тимофеевич, доктор физико-математических наук, заведующий отделом, главный научный сотрудник Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»,

Рахуба Максим Владимирович, кандидат физико-математических наук, доцент Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук», в своем положительном заключении, подписанном доктором физико-математических наук, профессором, членом-корреспондентом РАН, главным научным сотрудником лаборатории обратных задач естествознания **Кабанихиным Сергеем Игоревичем** и доктором физико-математических наук, заведующим лабораторией обратных задач естествознания **Шишлениным Максимом Александровичем** и утвержденном директором Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Института вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук», доктором физико-математических наук, профессором РАН **Марченко Михаилом Александровичем**, указала, что работа соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней» ВАК при

Минобрнауки России, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», а её автор Желтков Дмитрий Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Соискатель имеет 16 опубликованных работ по теме диссертации:

1. TTDock: метод докинга на основе тензорных поездов / Д. А. Желтков [и др.] // Вычислительные методы и программирование. – 2013. — Т. 14. — С. 279—291.
2. Желтков, Д. А. Увеличение размерности в методе докинга на основе тензорных поездов / Д. А. Желтков, Е. Е. Тыртышников // Вычислительные методы и программирование. — 2013. — Т. 14. — С. 292—294.
3. Evaluation of the docking algorithm based on tensor train global optimization / I. V. Oferkin [и др.] // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. — 2015. — Т. 8, No 4.
4. Evaluation of the novel algorithm of flexible ligand docking with moveable target-protein atoms / A. V. Sulimov [и др.] // Computational and structural biotechnology journal. — 2017. — Т. 15. — С. 275—285.
5. Tensor train global optimization: Application to docking in the configuration space with a large number of dimensions / A. V. Sulimov [и др.] // Russian Supercomputing Days. — Springer. 2017. — С. 151—167.
6. Docking of oligopeptides / A. Sulimov [и др.] // Russian Chemical Bulletin. — 2019. — Т. 68, No 9. — С. 1780—1786.
7. Supercomputer docking with a large number of degrees of freedom / A. Sulimov [и др.] // SAR and QSAR in Environmental Research. — 2019. — Т. 30, No 10. — С. 733—749.

8. Tensor based approach to the numerical treatment of the parameter estimation problems in mathematical immunology / V. V. Zheltkova [и др.] // *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*. — 2018. — Т. 26, No 1. — С. 51—66.
9. Zheltkova, V. V. Modelling HIV infection: model identification and global sensitivity analysis / V. V. Zheltkova, D. A. Zheltkov, G. A. Bocharov // *Matematicheskaya Biologiya i Bioinformatika*. — 2019. — Т. 14, No 1. — С. 19—33.
10. Application of the global optimization methods for solving the parameter estimation problem in mathematical immunology / V. V. Zheltkova [и др.] // *International Conference on Large-Scale Scientific Computing*. — Springer. 2019. — С. 203—209.
11. Zheltkov, D. Global optimization based on TT-decomposition / D. Zheltkov, E. Tyrtysnikov // *Russian Journal of Numerical Analysis and Mathematical Modelling*. — 2020. — Т. 35, No 4. — С. 247—261
12. Zheltkov, D. A. Global Optimization Algorithms Using Tensor Trains / D. A. Zheltkov, A. Osinsky // *International Conference on Large-Scale Scientific Computing*. — Springer. 2019. — С. 197—202.
13. Желтков, Д. А. Параллельная реализация матричного крестового метода / Д. А. Желтков, Е. Е. Тыртышников // *Вычислительные методы и программирование*. — 2015. — Т. 16, No 3. — С. 369—375.
14. Fast and accurate finite-difference method solving multicomponent Smoluchowski coagulation equation with source and sink terms / A. P. Smirnov [и др.] // *Procedia Computer Science*. — 2016. — Т. 80. — С. 2141—2146.
15. Tensor train versus Monte Carlo for the multicomponent Smoluchowski coagulation equation / S. A. Matveev [и др.] // *Journal of Computational Physics*. — 2016. — Т. 316. — С. 164—179.
16. Stefonishin, D. A. Tensors in modelling multi-particle interactions / D. A. Stefonishin, S. A. Matveev, D. A. Zheltkov // *International*

Все эти работы опубликованы в изданиях, удовлетворяющих требованиям ВАК.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается тематикой исследований, проведенных в диссертации. **Жуков Виктор Тимофеевич** является известным специалистом в области вычислительной математики и математического моделирования. **Рахуба Максим Владимирович** – специалист в сфере тензорных вычислений, в том числе с применением тензорных поездов. Тематика диссертации соответствует области экспертизы ведущей организации.

На автореферат отзывов не поступало.

Диссертация посвящена разработке и применению методов аппроксимации и оптимизации на основе тензорных поездов. В работе представлены метод глобальной оптимизации на основе разложения в тензорный поезд, а также параллельные реализации методов крестовой интерполяции матриц и тензоров.

Теоретическая значимость работы заключается в обосновании метода глобальной оптимизации на основе тензорных поездов для случая матриц и использования интерполяций ранга 1 в процессе оптимизации.

Практическая значимость работы состоит в программной реализации предложенных алгоритмов и их применении к прикладным задачам.

Научная новизна работы состоит в следующем:

1. Впервые разработан метод глобальной оптимизации на основе тензорных поездов.
2. Произведено обоснование метода глобальной оптимизации на основе тензорных поездов для двумерного случая при использовании аппроксимаций ранга 1.
3. Предложен оригинальный способ адаптивного поиска ранга для ТТ-крестового метода.

4. Впервые произведён докинг с подвижным активным центром белка.

Достоверность результатов диссертационной работы обосновывается использованием в работе строгих математических выводов. Обоснованность выводов, сформулированных в диссертации, подтверждена квалифицированной апробацией на международных и российских научных конференциях и семинарах, а также публикациями результатов исследований в рецензируемых научных изданиях, в том числе, рекомендованных ВАК.

Личный вклад соискателя. Диссертационное исследование является самостоятельным законченным трудом соискателя. Основные результаты получены соискателем лично. В работах [1-2] автором предложен и применён к задаче докинга белок-лиганд метод глобальной оптимизации на основе тензорных поездов. В работах [3–6] автором проведены численные эксперименты с использованием предложенного метода для различных пар белок-лиганд, которые позволили произвести сравнение с другими методами. В работе [7] автором произведена модификация реализации алгоритма, позволившая осуществлять докинг с подвижным активным центром белка, количество степеней свободы при проведении численных экспериментов достигало 157. В работах [8-10] метод глобальной оптимизации на основе тензорных поездов применялся к задаче идентификации параметров моделей ВИЧ-инфекции на клеточном уровне, автором произведены численные эксперименты по сравнению с другими методами. В работе [11-12] автором приводится описание и обоснование метода глобальной оптимизации на основе тензорных поездов. В работе [13] автором предложен и реализован параллельный алгоритм матричного метода крестовой интерполяции и проведено его тестирование. В работах [14-16] автором реализованы и применены к решению уравнению Смолуховского ряд алгоритмов, реализующих операции с тензорными поездами, в том числе применены предложенные автором параллельные реализации матричного и тензорного методов крестовой интерполяции.

На заседании **20 июня 2022 г.** диссертационный совет принял решение: за разработку и применение методов аппроксимации и оптимизации на основе тензорных поездов, присудить **Желткову Дмитрию Александровичу** ученую степень кандидата физико–математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 17 человек, из них 17 докторов наук по специальности 1.2.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ», участвовавших в заседании, из 22 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 17, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Заместитель председателя диссертационного совета

д. ф. – м. н.

Агошков Валерий Иванович

Ученый секретарь диссертационного совета

д. ф. – м. н.



Бочаров Геннадий Алексеевич

20.06.2022 г.