

ОТЗЫВ

официального оппонента по кандидатской диссертации Долгова Сергея Владимировича на тему “Алгоритмы и применения тензорных разложений для численного решения многомерных нестационарных задач”, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – вычислительная математика.

Моделирование физических процессов с учетом хаотичности является важнейшей современной задачей. Причины ее возникновения могут быть различными. Например, неточность измерительных приборов вносит шум в исходные данные, и целью моделирования может быть исследование соответствующих отклонений в выходных данных. Другим типом случайности может быть хаотичность поведения самой физической системы, для чего требуются разработка специальной модели с самого начала. Классическим примером является уравнение Шредингера: квантовый мир принципиально не детерминирован, поэтому единственно адекватным описанием является вероятностное (волновая функция и плотность распределения вероятности).

Стохастические модели находят широкое применение и в рамках классической механики. Чаще всего это требуется если, например, частиц слишком много для возможности учета каждой из них, но еще слишком мало для того, чтобы усредненная модель давала достаточную точность. В таком случае, разумно считать индивидуальные поведения частиц хаотическими флуктуациями, и описывать систему функцией, определяющей вероятность каждого состояния частицы.

В диссертации рассмотрены два важных случая такой вероятностной постановки. Первый – кинетическое описание Фарлей-Бунемановской неустойчивости в плазме ионосферы Земли. Фарлей-Бунемановская неустойчивость возникает из-за разного характера движения электронов и ионов в геомагнитном поле в E-слое ионосферы. Возникают условия для возникновения неустойчивости, которая приводит к отклонению от первоначального максвелловского распределения ионов по скоростям, в связи с чем простого задания их концентраций в пространстве недостаточно. Требуется моделировать одночастичную функцию распределения ионов, зависящую и от пространственных координат, и от скоростей. Ее описание дается четырехмерным уравнением Власова.

Вторым приложением является основное кинетическое уравнение (ОКУ), как модель некоторых биологических реакций. Клеточные явления часто носят упомянутый случайный характер: молекулы протеинов и других веществ движутся хаотически, и, соответственно, реакции между ними возникают в случайные моменты времени. В макроскопических масштабах эти флуктуации усредняются, и ими можно пренебречь. Однако клетки могут содержать штучные количества молекул некоторых веществ, и их флуктуации весьма существенны. Кроме того, случайным может быть приток и отток веществ через мембрану клетки. Основное кинетическое уравнение определяет функцию вероятности всех возможных сочетаний количеств веществ, и таким образом правильно описывает случайные процессы в системной биологии.

Основная проблема численного решения этих уравнений состоит в огромном количестве значений вероятности или распределения, возникающих после дискретизации многомерных функций. Если четырехмерное уравнение еще можно решить с использованием параллельных суперкомпьютеров, то более многомерные задачи, например,

20-мерное ОКУ, невозможно хранить даже на мощнейших распределенных системах. В диссертации предлагается аппроксимировать дискретные операторы и решения с помощью усовершенствованных методик сжатия данных путем разделения переменных. Базовые представления (малоранговое разложение матрицы, его многомерные обобщения, форматы Таккера и ТТ) были предложены ранее, но не существовало надежного и вместе с тем быстрого алгоритма решения конкретных задач линейной алгебры, возникающих в процессе интегрирования уравнений Власова и ОКУ по времени. В диссертации разработан новый итерационный алгоритм переменных направлений (АМEn), который впервые позволил решать сверхбольшие несимметричные системы линейных уравнений, к которым приводит неявная схема Кранка-Николсон для ОКУ. Помимо этого, модификация алгоритма дает существенное ускорение и в приближенном интегрировании уравнения Власова с помощью явных схем. Также для рассмотренных задач представлен анализ начальных данных и дискретных операторов с точки зрения разделения переменных, показана их представимость в ТТ формате.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Во введении обосновывается актуальность работы и научная новизна, приводится список публикаций и докладов автора. В первой главе формулируются:

1. задача Фарлей-Бунемановской неустойчивости на основе решения кинетического уравнения для ионов и уравнений гидродинамики для электронов;
2. задача моделирования стохастических клеточных реакций с помощью основного кинетического уравнения.

Приводятся схемы дискретизации по пространству и расщепления по времени, описываются основные свойства данных моделей и физические процессы, которые они описывают. В последнем разделе первой главы предлагается альтернативная запись схем Кранка-Николсон и Эйлера в виде большой системы уравнений сразу на все временные слои решения. Математически такая запись эквивалентна схемам в стандартной формулировке, но после введения приближенного сжатия данных, позволяет вычислять то же количество шагов по времени с меньшими затратами. Это продемонстрировано далее в численных экспериментах в главе 5.

Вторая часть в основном дает обзор методов разделения переменных. Описываются алгоритмы сжатия данных, а также операций линейной алгебры непосредственно в структурированных представлениях. В конце главы представлена новая комбинация малоранговых представлений (QTT-Tucker), которая, как опять же показано в численных примерах, может давать дополнительное уменьшение вычислительных затрат.

Третья глава посвящена представлению начальных данных и операторов, возникающих в уравнении Власова для ФБ неустойчивости и ОКУ. Конструктивно доказывается существование аналитических представлений с разделенными переменными для матриц перехода в явной схеме интегрирования уравнения Власова, а также типичного примера из системной биологии – каскада реакций.

Четвертая глава посвящена итерационным методам решения систем линейных уравнений с представлением матрицы, правой части и решения в форматах с разделенными переменными. Приводятся формулировки и свойства неточного (для учета ошибок, вносимых сжатием данных) метода GMRES и методов переменных направлений. Во второй части четвертой главы предлагается новый алгоритм (АМEn), представляющий собой эффективную комбинацию алгоритмов переменных направлений,

используемых в теоретической квантовой физике (DMRG), и стандартных итерационных алгоритмов численного матричного анализа (градиентный спуск). Для нового алгоритма доказывается сходимость к точному решению исходной системы уравнений, т.е. результат, неизвестный ранее для алгоритма DMRG. Приводится теоретическое сравнение с другим похожим методом из квантовой физики (корректированным одноблочным DMRG), показываются преимущества нового метода AMEn, предложенного автором, в частности, доказательство сходимости и отсутствие эвристических параметров, приводящих к возмущению решения. В конце главы приводится подробное описание практических аспектов реализации алгоритма как для решения систем линейных уравнений, так и для эффективного приближенного вычисления матричного произведения в формате TT.

В пятой главе приводятся результаты численных экспериментов, подтверждающие эффективность предложенных методов. Рассматриваются три важных примера из системной биологии, в которых используется модель основного кинетического уравнения, а также модельный случай Фарлей-Бунемановской неустойчивости. Численные эксперименты содержат достаточно подробное исследование особенностей новых алгоритмов: точности и вычислительной сложности по сравнению с ранее известными подходами, влияние специфических для новых методов параметров на результат. Поскольку диссертация посвящена вычислительной математике, параметры рассмотренных ОКУ и уравнения Власова взяты из предшествующих работ. Тем не менее, данные примеры являются релевантными и вполне обосновывают применимость разработанных численных алгоритмов. Так, для случая Фарлей-Бунемановской неустойчивости показано, что использование новых вычислительных алгоритмов, при сохранении качественно тех же ранее полученных результатов, приводит к сокращению вычислительного времени в несколько раз, а объем требуемой памяти сокращается почти на два порядка.

К диссертации можно высказать следующие замечания.

1. В будущей работе будет разумно перейти к конкретным задачам, возникающим в настоящее время в системной биологии. Также, интересуют и более масштабные расчеты Фарлей-Бунемановской неустойчивости на более мелких сетках, и с более реальным интегралом столкновений частиц, а не только с простым модельным BGK приближением.
2. В квантовой физике конденсированных состояний активно используются более сложные тензорные форматы, адаптированные под положение частиц в пространстве. TT формат соответствует линейной цепочке. В дальнейшем также хотелось бы иметь обобщения предложенных алгоритмов на другие тензорные форматы.
3. Хотелось бы использовать упрощенные вычислительные схемы, сохраняющие инвариантные величины. Так, в задаче о Фарлей-Бунемановской неустойчивости не сохраняется число частиц. И хотя несохранение не значительно (несколько процентов), но хотелось бы, чтобы вычислительная схема либо была консервативна по этому параметру, либо в нее необходимо было бы вводить периодическую коррекцию.

Данные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы, результаты которой обладают новизной и представляются практически значимыми. Диссертация представляет собой завершённую работу по апробации и при-

