

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.045.01 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ИНСТИТУТА ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ РАН

по диссертации **Михалева Александра Юрьевича** на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Метод построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы по её элементам» в виде рукописи по специальности 01.01.07 – «вычислительная математика» выполнена на кафедре вычислительных технологий и моделирования факультета вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного учреждения высшего профессионального образования Московского государственного университета имени М.В.Ломоносова.

Диссертация принята к защите «29» октября 2014 года.

Соискатель **Михалев Александр Юрьевич** является гражданином Российской Федерации и работает разработчиком программного обеспечения в Сколковском институте науки и технологий.

В 2013 году соискатель окончил аспирантуру факультета Вычислительной математики и кибернетики Федерального государственного бюджетного учреждения высшего профессионального образования Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент Сколковского института науки и технологий **Оседец Иван Валерьевич**.

Официальные оппоненты:

1. доктор физико-математических наук, профессор **Самохин Александр Борисович**, заведующий кафедрой «Прикладная математика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Московский государственный технический университет радиотехники, электроники и автоматики»,
2. доктор физико-математических наук, профессор **Смирнов Юрий Геннадьевич**, заведующий кафедрой «Математика и суперкомпьютерное моделирование» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования «Пензенский государственный университет»

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук дала положительное заключение (заключение составлено кандидатом физико-математических наук, старшим научным сотрудником лаборатории математических задач геофизики **Шишлениным Максимом Александровичем** и доктором физико-математических наук, член-корреспондентом РАН, ВРИО директора **Кабанихиным Сергеем Игоревичем**).

На диссертацию и автореферат отзывов не поступило.

Соискатель имеет 2 опубликованные работы, из них по теме диссертации опубликовано 2 научных работы, в том числе 1 (одна) статья в научных журналах и изданиях, которые включены в перечень российских рецензируемых научных

журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций, а также 1 (одна) работа в зарубежных научных изданиях.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации:

1. Oseledets I.V., Mikhalev A.Yu. Representation of quasiseparable matrices using excluded sums and equivalent charges // Linear Algebra Appl. – 2012. – Vol. 436, Issue 3 – P. 699–708.
2. Михалев А.Ю., Офёркин И.В., Оселедец И.В., Сулимов А.В., Тыртышников Е.Е., Сулимов В.Б. Применение мультитарядового приближения больших плотных матриц в рамках модели поляризуемого континуума для растворителя // Вычислительные методы и программирование. – 2014. – Т. 15. – с. 9–21.

Результаты диссертационной работы докладывались автором и обсуждались на научных семинарах НИВЦ МГУ, ИПМ РАН, ИВМ РАН, ИВМиМГ СО РАН и на конференциях: 52-я научная конференция МФТИ (2009), 55-я научная конференция МФТИ (2012), трехсторонний франко-немецко-российский научный семинар «Разделение переменных и приложения» (2010), международная научная конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Ломоносов- 2011», научная конференция «Ломоносовские чтения-2011», научная конференция «Ломоносовские чтения-2012», научная конференция «Ломоносовские чтения-2013», научная конференция «Ломоносовские чтения-2014», международная суперкомпьютерная конференция «Научный сервис в сети Интернет: поиск новых решений» (2012), симпозиум «Биоинформатика и компьютерное конструирование лекарств» в рамках XXI Российского национального конгресса «Человек и лекарство» (2014).

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

введено определение p -объёма прямоугольных матриц, предложены алгоритм поиска прямоугольных экстремальных подматриц и итерационный метод построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы по её элементам, превосходящий известные подходы по достижимой точности и требуемым для расчётов времени и памяти, доказаны оценки роста коэффициентов разложения матрицы по строкам прямоугольной подматрицы максимального 2-объёма и оценки погрешности псевдоскелетной аппроксимации на основе прямоугольных подматриц, созданы и размещены в открытом доступе в сети «Интернет» программные пакеты h2tools и rect_maxvol, реализующие предложенные алгоритмы.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

доказаны оценки погрешности псевдоскелетной и CGR аппроксимаций на основе прямоугольных подматриц, являющиеся логическим расширением ранее известных оценок погрешности для аппроксимаций на основе квадратных подматриц, сформулирован и доказан принцип максимального 2-объёма.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

созданный автором программный пакет h2tools был успешно применён для ускорения расчётов энергий сольватации различных комплексов белок-лиганд, чему посвящена глава 4 диссертации.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

различные оценки погрешности псевдоскелетных и CGR аппроксимаций, равно как и оценки роста коэффициентов в задаче поиска экстремальной подматрицы, получены с использованием строгого математического аппарата, количество итераций «мультизарядового» метода построения блочно-малоранговых аппроксимаций, необходимых для достижения требуемой точности, оценено при помощи численных экспериментов на примере двух задач, проведено сравнение результатов применения программного пакета h2tools для вычисления энергии сольватации комплекса белок-лиганд с результатами, полученными при помощи известных методов.

Личный вклад соискателя состоит в следующем: автором доказаны оценки погрешности псевдоскелетной и CGR аппроксимаций на основе прямоугольных подматриц, оценки роста коэффициентов в задаче поиска экстремальной подматрицы, сформулированы, формализованы в виде блок-алгоритмов и выложены в открытый доступ в виде программных пакетов алгоритм поиска подматрицы максимального 2-объёма и метод построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы по её элементам, проведён анализ применимости предложенного в диссертации «мультизарядового» метода для задач электростатики и сольватации, оценена зависимость количества итераций от требуемой точности.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи (проблемы) и соответствует критерию внутреннего единства, что подтверждается основной идейной линией.

Диссертационный совет пришёл к выводу о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней, утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 30 января 2002 г. № 74 (в редакции постановления Правительства Российской Федерации от 20 июня 2011 г. № 475), и принял решение присудить **Михалеву Александру Юрьевичу** ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 18 человек, из них 6 докторов наук (указывается отдельно по каждой специальности научных работников каждой отрасли науки, защищаемой диссертацией), участвовавших в заседании, из 23 человек, входящих в состав совета, (*) (из них 0 человек дополнительно введены на разовую защиту), проголосовали: за присуждение учёной степени 18, против присуждения учёной степени 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель диссертационного совета Д 002.045.01
член-корреспондент РАН,
доктор физико-математических наук,
профессор


Е.Е.Тыртышников

Учёный секретарь диссертационного
совета Д 002.045.01
доктор физико-математических наук


Г.А.Бочаров

«30» декабря 2014 г.

