

Отзыв

официального оппонента д.ф.-м.н., профессора Смирнова Ю.Г. на диссертационную работу "Метод построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы по её элементам" Михалева Александра Юрьевича, представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – вычислительная математика.

Актуальность темы исследования. Диссертация посвящена блочно-малоранговым матрицам и их малопараметрическим представлениям. Интерес к таким матрицам обоснован тем, что они возникают в различных физических задачах, например в задачах аэро- и гидродинамики. Существующие методы построения малопараметрических представлений блочно-малоранговых матриц опираются на аналитические разложения и дополнительные геометрические конструкции, что сокращает класс применимых задач. В связи с этим, разработка алгебраического метода построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы лишь по элементам самой матрицы является актуальной и практически важной задачей.

Оценка содержания диссертационной работы. Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Во введении обсуждается тема работы и дается ее общая характеристика, приводится обзор литературы по теме диссертации, формулируются цели исследования, основное содержание работы и положения, выносимые на защиту, указываются публикации автора по теме диссертации и апробация работы.

В **первой главе** приводятся предварительные сведения: скелетное разложение и различные оценки погрешности скелетной и псевдоскелетной аппроксимаций в чебышёвской и спектральной нормах, принцип максимального

объёма, доминантные подматрицы, мозаичное разбиение матрицы, мозаично-скелетная структура, блочные строки и блочные столбцы мозаичного разбиения с соответствующей структурой блочно-малоранговых матриц.

Вторая глава посвящена аппроксимационным свойствам прямоугольных подматриц. В **разделе 2.1** сформулировано обобщённое понятие p -объёма матриц. В **разделе 2.1.1** сформулирован принцип максимального 2-объёма подматрицы: если подматрица обладает максимальным 2-объёмом среди всех подматриц размера $K \times r$ в матрице размера $N \times r$, то существует такая матрица коэффициентов, что длина любой её строки ограничена сверху выражением

$$\sqrt{\frac{r}{K+1-r}}.$$

Раздел 2.1.2 содержит описание жадного алгоритма поиска подматрицы максимального 2-объёма. В **разделе 2.2** проведена работа по расширению существующих оценок псевдоскелетной аппроксимации $A \approx C\hat{A}^\dagger R$, где C содержит базисные столбцы матрицы A , R содержит базисные строки матрицы A , а матрица \hat{A}^\dagger – псевдообратная к подматрице на пересечении базисных строк и столбцов. Расширенные оценки сформулированы в Теоремах 2.2.1-2.2.4.

Третья глава содержит описание предлагаемого в диссертационной работе «мультизарядового» метода приближения блочно-малоранговых матриц при помощи H^2 -матриц. **Раздел 3.1** посвящен «мультизарядовому» представлению H^2 -матриц. Для практической реализации метода предлагаются Алгоритмы 4-7 в **разделах 3.2-3.3**. В **разделе 3.4** проведена апробация предложенного в **разделе 3.3** итерационного процесса на двух задачах: задаче электростатики и задаче вычисления полярной составляющей энергии сольватации молекулы.

В **четвёртой главе** «мультизарядовый» метод применяется при численном решении интегрального уравнения (4.2), для приближения плотных матриц для ускорения вычисления энергий десольватаций различных молекул с лигандами.

Матрица системы при этом оказывается блочно-малоранговой и, более того, соответствующие блочные строки и столбцы могут быть приближены матрицами малых рангов с любой требуемой точностью. Поэтому оказывается возможным применение «мультизарядового» метода для приближения системы уравнений.

В **заключении** отмечено одно из преимуществ «мультизарядового» метода: количество элементов матрицы, которые необходимо вычислить для построения H^2 -приближения, составляет всего $O(N)$ значений.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций. Для обоснования научных результатов Михалев А.Ю. использует как теоретические выводы, так и численные эксперименты: оценки роста коэффициентов в задаче поиска экстремальной подматрицы и погрешность прямоугольной псевдоскелетной аппроксимации доказаны теоретически, зависимость погрешности "мультизарядового метода" от количества итераций показана численными экспериментами. На примере прикладной задачи приведено сравнение результатов, полученных автором с использованием предлагаемого в диссертации "мультизарядового метода", с результатами, полученными с использованием других методов.

Научная новизна. Автором диссертации предложено новое понятие объёма матрицы, применимое к прямоугольным матрицам. Для частного случая 2-объёма, доказана связь с определителем. Предложен алгоритм поиска подматрицы максимального 2-объёма, доказан рост коэффициентов, расширены оценки прямоугольных псевдоскелетных аппроксимаций. Разработан алгебраический итерационный метод построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы по её элементам.

Практическая ценность. За счёт того, что "мультизарядовый метод", являющийся основным результатом работы, представляет собой алгебраический метод и использует только элементы матрицы, он лишен недостатков ряда других известных методов. В главе 4 для решения поверхностного интегрального уравнения был применён "мультизарядовый метод" построения аппроксимации. Было достигнуто ускорение в 300 раз (по сравнению с известным методом) на поверхности, состоящей из более чем 500000 дискретных элементов. "Мультизарядовый метод" может быть применен, например, при решении задач дифракции, возникающих в акустике и электродинамике.

В целом, результаты, полученные и описанные Михалевым А.Ю., являются новыми, актуальными и практически значимыми. Основные результаты диссертации опубликованы в двух печатных работах и неоднократно обсуждались на научных семинарах ИВМ РАН, ИПМ РАН и НИВЦ МГУ.

Замечания по диссертационной работе.

1. В Главе 4 решается интегральное уравнение (4.2), однако свойства этого уравнения (фредгольмовость, разрешимость, единственность решений и т.д.) не указываются, выбор функциональных пространств для решений уравнения не производится, а сразу проводится дискретизация уравнения. Было бы уместно привести указанные свойства.
2. Не объясняется выбор формулы для вычисления матричных коэффициентов в (4.4) при совпадении индексов (именно эта формула позволяет избежать вычисления интегралов, содержащих особенность).
3. Было бы желательно указать область применимости предлагаемого метода, возможность решения других аналогичных уравнений (возникающих, например, в акустических и электромагнитных задачах дифракции) предложенным методом.

Рекомендации по использованию результатов диссертации. Полученные результаты могут быть использованы в МГУ, ИВМ РАН, ВЦ РАН, ИПМ РАН, МФТИ, МГТУ им. Баумана, ПГУ, а так же в других учреждениях и организациях.

Заключение. Считаю, что диссертация Михалева А.Ю. выполнена на высоком уровне и является законченным научно-исследовательским трудом, в котором решена практически важная задача в области вычислительной математики. Автореферат соответствует основному содержанию диссертации.

В связи с вышеизложенным считаю, что диссертация Михалева А.Ю. "Метод построения блочно-малоранговой аппроксимации матрицы по её элементам", представленная на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07 – «Вычислительная математика», соответствует всем требованиям ВАК Российской Федерации, предъявляемым к кандидатским диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.01.07– «Вычислительная математика».

Заведующий кафедрой «Математика и суперкомпьютерное моделирование»
ФГБОУ ВПО «Пензенский государственный университет»,
доктор физико-математических наук, профессор,

Смирнов Ю.Г.

Подпись Ю.Г. Смирнова заверяю

Ученый секретарь Ученого совета



Дорощева О.С.

440026, Пенза, ул. Красная, 40, ФГБОУ ВПО «Пензенский государственный университет», кафедра «Математика и суперкомпьютерное моделирование»
тел.: 841-2-368096 e-mail: mmm@pnzgu.ru