

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертацию КОРОТИНА Александра Андреевича

«Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров», представленную на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 -
«Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Актуальность работы

Расстояние Васерштейн – геометрически осмысленная метрика на пространстве вероятностных распределений, построенная на идеях оптимального транспорта вероятностной массы Л. Канторовича. С математической точки зрения теоретический аппарат оптимального транспорта (ОТ) представляет собой инструмент для осуществления анализа на пространстве вероятностных распределений. С практической точки зрения ОТ позволяет строить эффективные численные методы для решения ряда задач моделирования. Среди наиболее популярных применений ОТ можно выделить задачу генеративного моделирования данных, в которой Васерштейн генеративные состязательные нейронные сети показывают хорошие результаты, опережая по качеству генерации многие методы, основанные на других метриках.

В то же время существует ряд важных задач моделирования, где методы ОТ имеют большой потенциал к применению и улучшению существующих решений этих задач. Примером такой задачи является, например, численное решение уравнения Фоккера-Планка, используемого для моделирования множества диффузионных процессов в физике, экономики, машинном обучении, демографии и пр. Его решение может быть представлено как градиентный поток в пространстве распределений с Вассерштейн-2 метрикой. Данная эквивалентность открывает возможности решать уравнения с помощью инструментария ОТ. К сожалению, на данный момент потенциал применения ОТ здесь раскрыт не полностью.

В общем, недостатком многих методов ОТ является их ограниченная масштабируемость. По большей части методы ОТ предназначены для работы с маломерными выборками данных и не всегда могут быть эффективно применены к многомерным и большим выборкам данных, встречающимся на практике. С учетом растущего числа приложений ОТ в науке и индустрии возникает потребность в разработке новых более эффективных и масштабируемых методов ОТ.

Разработка новых численных методов ОТ позволит применять ОТ к большим выборкам данных в больших размерностях. Как следствие, это позволит (а) более эффективно применять методы ОТ для решения задач моделирования где ОТ уже применяется (генеративные модели, доменная адаптация и пр.); (б) разработать применения ОТ к новым задачам моделирования и улучшить их существующие решения (моделирование диффузий и др.). Особо перспективным направлением является разработка методов ОТ на основе нейросетей. Глубокие нейросети уже показали значительное улучшение во многих задачах математического моделирования по сравнению с классическими методами (не использующими нейросети) и разумно ожидать, что использование нейросетей может позволить масштабировать также и методы ОТ.

Из вышесказанного, можно сделать вывод, что тема диссертации «Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров» является актуальной и значимой. Отмечу, что слово «параметрические» в названии фактически обозначает «нейронные», так как по ходу работы автор использует именно нейросетевую

параметризацию во всех случаях.

Характеристика работы

Работа содержит введение, 5 глав и заключение и посвящена разработке нейросетевых методов для вычисления ОТ с квадратичной функцией стоимости (Васерштейн-2 метрикой). Представлены 4 основных результата: 3 численных метода (алгоритма) для вычисления Васерштейн-2 оптимальных отображений, барицентров и градиентных потоков, а так же предложен подход для тестирования численных методов ОТ для Васерштейн-2.

Первая глава работы кратко вводит читателя в курс дела и описывает 4 рассматриваемые задачи ОТ и показывает взаимосвязи между ними. Затем каждому результату уделяется отдельная глава из 2-5, где детально ставится соответствующая задача и представляется соответствующий результат – численный метод её решения. Диссертация является связным и последовательным изложением материала, каждая следующая глава логично продолжает следующую. Несмотря на это, каждую из пяти глав можно читать независимо от других глав, что является большим плюсом, т.к. это упрощает процесс анализа результатов.

Главы 2-4 организованы примерно одинаковым образом: математически ставится рассматриваемая задача ОТ, вводятся основные обозначения, описываются проблемы существующих методов решения задачи. Затем предлагается и теоретически обосновывается новый численный метод для её решения, описывается численная процедура оптимизации и тестируется в ряде синтетических и модельных задач (в каждой из глав метод тестируется не менее, чем на трех задачах). В большинстве экспериментов проводится экспериментальное сравнение с альтернативными методами для решения рассматриваемых задач и приводится качественное/количественное сравнение.

В главе 5 автор предлагает методологию тестирования нейросетевых методов Васерштейн-2 ОТ. Здесь сначала большое внимание уделяется мотивации построения бенчмарка и обзору релевантной литературы по теме. Основной результат главы – сама теоретически обоснованная методология и масштабное тестирование ряда существующих методов. Здесь автор так же тестирует и предложенный метод из главы 2.

В целом, работа написана на высоком уровне и содержит много научных результатов, как математических (теоремы, алгоритмы), так и экспериментальных (тестирование разработанных методов в приложениях), поэтому в дальнейшей секции я охарактеризую самые интересные и перспективные из них.

Характеристика результатов: новизна, достоверность и обоснованность

Результаты работы являются новыми, о чем, в частности, свидетельствует тот факт, что в обзоре литературы и экспериментах проводится сравнение со свежими научными результатами 2020-2021 годов. В то же время все результаты работы опубликованы на ведущих международных конференциях по машинному обучению, что дополнительно свидетельствует о научной новизне результатов, достоверности и обоснованности.

Ключевое новшество результатов глав 1-3 работы в том, что предлагаются новые целевые функционалы оптимизации (функции потерь) для которых не требуется минимаксная оптимизация. Это естественно упрощает процесс обучения моделей. Например, в главе 2 диссертации автор упоминает существующий метод вычисления барицентра, который требует min-max-min оптимизации (которая еще сложнее min-max). В то же время сам автор предлагает новую математическую обоснованную регуляризацию, которая позволяет свести задачу к чистой минимизации. Аналогичные утверждения верны и про результаты глав 2 и 4 работы (алгоритмы для вычисления ОТ отображений и градиентных потоков).

С математической точки зрения особый интерес представляют теоремы 2.4.1, 2.4.2, 3.4.1 и 3.4.2, которые являются теоретическим обоснованием для предложенных функционалов оптимизации. Фактически, в них доказывается, что предложенная регуляризация не вносит смещения в решение задачи, а так же обосновывается возможность использования ограниченного класса параметрических аппроксиматоров (нейросетей) для численного решения задачи. Результаты снабжены детальными и математически строгими доказательствами. Как логичное следствие, автор приводит численные процедуры для стохастической оптимизации предложенных функционалов с использованием нейросетей. С точки зрения моделирования, работа интересна тем, что предложенные методы имеют большой потенциал применения в задачах моделирования, машинного обучения, обработки изображений и искусственного интеллекта. В работе автор проводит большое число различных вычислительных экспериментов с разработанными методами, подтверждающих это утверждение. Например, метод ОТ из главы 2 тестируется в задачах переноса стиля между непарными наборами изображений, в задаче доменной адаптации, метод для вычисления барицентров (глава 3) и градиентных потоков тестируется в задачах байесовского вывода (агрегация апостериорных распределений, байесовская логистическая регрессия) и пр. В большинстве случаев метод превосходит альтернативные методы для решения данной задачи. В то же время, в ряде мест работы честно обсуждаются ограничения предложенных методов (например, стр. 50 или стр. 99). Подводя итог, можно сказать, что результаты работы новы, и, на мой взгляд, достоверны и обоснованы.

Замечания по работе

1. В разделе 2.6.7 для решения задачи непарного переноса стиля автор приводит качественный результат работы метода. Было бы интересно посмотреть на количественные метрики и сравнения с альтернативными методами для решения данной задачи.
2. В разделе 4.4.1 количественно оценивается насколько хорошо метод вычисляет стационарное распределение. При этом не поясняется, как быстро сходится градиентный поток к этому распределению с теоретической точки зрения.
3. В синтетических экспериментах (например, разделы 2.6.2 или 3.6.1) приведены полученные транспортированные распределения, но не показано, как выглядит само вычисленное транспортное отображение.
4. Для предложенного метода вычисления градиентного потока детально проанализирована вычислительная сложность (Табл. 11), но для методов глав 2 и 3 автор ограничивается лишь кратким описанием их сложности (стр. 30). Для полноты картины стоило сделать для них аналогичные таблицы.
5. В главе 4 автор моделирует градиентные потоки функционала свободной энергии Фоккера-Планка. По всей видимости, методология автора легко обобщается и на некоторые другие функционалы, о чем автор пишет на стр. 88, однако, не приводит конкретных примеров.

Замечания по терминологии и стилистике:

1. В диссертации исследуются ОТ отображения, барицентры и W2 градиентные потоки, однако в названии отображены только первые два пункта.
2. В диссертации автор работает с вероятностными мерами, но зачастую использует как термин “мера”, так и “распределение”. Для единообразия изложения в разных главах

стоит использовать только один из терминов.

3. В главе 5 для обозначения численных методов оптимального транспорта используется термин “решатель ОТ”, что, видимо, является переводом фразы “OT solver”, используемой в англоязычной литературе. Считаю, что термин не удачный, лучше было обойтись без него.

Заключение

Диссертация А.А. Коротина выполнена на высоком математическом уровне и является законченной научно-квалификационной работой, в которой разработан, теоретически обоснован и экспериментально протестирован ряд эффективных численных методов оптимального транспорта на основе глубоких нейросетей. Сделанные замечания не снижают общую положительную оценку работы. Автореферат раскрывает основное содержание диссертационной работы и отвечает требованиям ВАК.

С учетом вышесказанного, диссертация А.А. Коротина «Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров» полностью соответствует требованиям «Положения о присуждении ученых степеней», предъявляемых к кандидатским диссертациям, а её автор заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент

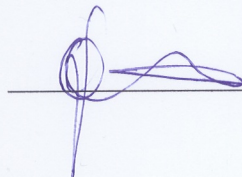
доктор физико-математических наук

(специальность 01.01.03 - «математическая физика»),

Заведующий лабораторией, старший научный сотрудник отдела №6

Орлов Юрий Николаевич

« 10 » 01 2023 г.

 / Орлов Ю.Н.

Адрес: 125047, Москва, Миусская пл., д.4

Федеральное государственное учреждение "Федеральный исследовательский центр

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук"

Тел. +7 499 978-13-14

E-mail: office@keldysh.ru

Сайт <https://www.keldysh.ru/>

Подпись Ю.Н. Орлова заверяю.

Ученый секретарь ИПМ им. М.В. Келдыша РАН

к.ф.-м.н.

