

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение высшего образования
«Московский физико-технический институт
(национальный исследовательский университет)»
(МФТИ, Физтех)

Юридический адрес: 117303, г. Москва,
ул. Керченская, дом 1А, корпус 1
Почтовый адрес: 141700, Московская обл.,
г. Долгопрудный, Институтский переулок, дом 9
Тел.: +7 (495) 408-42-54, факс: +7 (495) 408-68-69
info@mipt.ru

20.01.2023 № 5.03-05/311
на № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ



Проректор по научной работе

Баган Виталий
Анатольевич

2023 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации 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. За последние несколько лет численные методы оптимального транспорта стали мощным инструментом для решения задач математического моделирования. Такие методы активно применяются на практике в генеративном моделировании для синтеза искусственных данных и решения задач доменной адаптации данных или моделей, в компьютерном зрении и обработке изображений — для переноса цвета и стиля, в компьютерной графике и вычислительной геометрии — для обработки 2D- и 3D-форм объектов и т.д. В то же время наблюдается значительный рост числа научных публикаций, в которых разрабатываются новые численные методы оптимального транспорта или же предлагаются подходы к их применению в новых задачах математического моделирования.

Существующие численные методы оптимального транспорта преимущественно дискретные, то есть предназначены для работы с маломерными данными, описываемыми дискретными распределениями с небольшим размером носителя. Как следствие, эти методы слабо масштабируются с ростом размера носителя и размерности данных. Это ограничивает возможность эффективного применения этих методов к задачам моделирования, в которых данные описываются многомерными непрерывными распределениями.

Для работы с многомерными непрерывными распределениями данных ведется активная разработка параметрических (непрерывных) методов. Такие методы обычно используют нейронные сети для аппроксимации решений. Они лучше масштабируются для применения к данным, описываемым многомерными непрерывными распределениями. Тем не менее, применение параметрических методов на практике является трудным. Часть существующих методов требует решения сложных минимаксных задач оптимизации. Другие же применяют регуляризацию для упрощения обучения. Это заведомо вносит систематическую ошибку

(смещение) в полученное решение, что значительно ухудшает точность найденного решения в пространствах большой размерности и ограничивает область применимости этих методов.

Данная диссертация посвящена разработке новых масштабируемых параметрических численных методов оптимального транспорта. С учетом большого и постоянно растущего числа приложений такого рода методов к задачам математического моделирования, тема диссертации является актуальной и перспективной.

Структура и объем. Диссертация состоит из введения, 5 глав и заключения.

Во введении дается общая характеристика работы. Обсуждается актуальность темы, цели и задачи работы, методология и методы исследования, практическая и теоретическая значимость, новизна, достоверность, публикации и личный вклад автора, а также приводятся положения, выносимые на защиту.

В главе 1 вводятся формальные математические постановки четырёх рассматриваемых в работе задач оптимального транспорта с квадратичной функцией стоимости (Васерштейн-2 метрикой): вычисление Васерштейн-2 оптимальных отображений между непрерывными распределениями, вычисление Васерштейн-2 барицентров, моделирование Васерштейн-2 градиентных потоков и построение эталонных пар распределений для Васерштейн-2 транспорта. Ключевые результаты работы изложены во 2-5 главах.

Для каждой задачи из 1-3 предлагается и обосновывается вычислительный алгоритм на основе нейронных сетей с выпуклой по входу архитектурой (главы 2-4). Для алгоритмов решения задач 1, 2 приводятся теоретические оценки ошибок. Все предложенные алгоритмы экспериментально тестируются на ряде задач моделирования, возникающих в машинном обучении. Приводятся как качественные, так и количественные результаты работы алгоритмов. Показывается превосходство алгоритмов, разработанных в диссертации, над существующими подходами.

В главе 5 работы синтезируется набор эталонных пар непрерывных распределений для качественного и количественного тестирования численных методов для Васерштейн-2 оптимального транспорта. На разработанных парах проводится оценка качества существующих численных методов для непрерывного Васерштейн-2 транспорта, в том числе и нового метода, разработанного в главе 2.

В заключении автор подводит итоги работы и указывает направления продолжения исследований.

Научные результаты и их значимость. В работе рассматривается ряд взаимосвязанных задач оптимального транспорта с квадратичной функцией стоимости. Предложены новые численные методы для их решения на основе выпуклых по входу нейронных сетей.

В главе 2 работы предлагается новый масштабируемый алгоритм для вычисления Васерштейн-2 оптимального отображения и расстояния между непрерывными распределениями, доступными через случайные выборки. Алгоритм базируется на применении новой разработанной в диссертации циклической регуляризации в двойственной задаче оптимального транспорта, за счет которой удастся избавиться от минимаксной оптимизации и смещения, присутствующего в существующих методах.

В главе 3 предлагается новый масштабируемый алгоритм для вычисления Васерштейн-2 барицентров семейств непрерывных вероятностных распределений. Алгоритм основывается на применении циклической регуляризации и регуляризации на конгруэнтность в двойственной задаче о барицентре.

В главе 4 предложен метод моделирования Васерштейн-2 градиентных потоков функционалов на пространствах вероятностных распределений, основанный на дискретизации градиентного потока по времени и на использовании выпуклых по входу нейронных сетей.

В главе 5 разрабатывается методология и наборы данных для тестирования непрерывных методов Васерштейн-2 оптимального транспорта.

Теоретическая значимость результатов 1-3 заключается в том, что алгоритмы, методы и математические подходы, предложенные в данной диссертации, позволили расширить класс задач математического моделирования, решаемых с использованием нейросетевых численных методов оптимального транспорта. В то же время, методы, разработанные в диссертации, имеют потенциал к применению к практическим задачам, что подтверждается обширным экспериментальным исследованием в диссертационной работе всех разработанных методов на ряде задач моделирования на синтетических и реальных данных.

Несмотря на активное развитие непрерывных численных методов оптимального транспорта, до сих пор не существует ни одного набора тестов для проверки качества работы этих методов. Результат главы 5 восполняет этот пробел в области математического моделирования с помощью оптимального транспорта. Таким образом, методология, разработанная в данной главе, является новой и значимой для научного сообщества.

Новизна. Ключевая новизна работы заключается в том, что разработанные параметрические алгоритмы для вычисления Васерштейн-2 оптимального транспорта (глава 2), барицентров (глава 3) и градиентных потоков (глава 4) в отличие от существующих методов одновременно не требуют минимаксной оптимизации, а также не используют регуляризацию (например, энтропийную), вносящую смещение в решение задачи. Как следствие, обучение предложенных методов более стабильно (позволяет проще и быстрее получать решения задач, избегая систематических ошибок), чем обучение существующих методов. Эти улучшения достигаются путем использования новых разработанных в работе регуляризаторов (циклический регуляризатор, глава 2, регуляризатор на конгруэнтность, глава 3) и применения выпуклых по входу нейронных сетей (главы 2-4).

С практической точки зрения, разработанные подходы к регуляризации задач оптимального транспорта в главах 2-4 позволяют более эффективно применять методы оптимального транспорта к задачам математического моделирования, в которых данные описываются многомерными непрерывными распределениями. С теоретической точки зрения, предложенные подходы к регуляризации двойственных задач значительно упрощают математический анализ полученных решений. Например, благодаря отсутствию минимаксности в предложенных целевых критериях, оптимизируемых алгоритмами, автор диссертации получил ряд теоретических результатов, связывающих ошибку минимизации предложенных функционалов, оптимизируемых алгоритмами, с ошибкой восстановления решения соответствующей задачи оптимального транспорта. Данные результаты математически обосновывают предложенные подходы к регуляризации.

Результат главы 5 (метод построения эталонных пар непрерывных распределений с аналитически известным Васерштейн-2 отображением по построению) является первым в

области и, ожидается, станет одним из ключевых бенчмарков (набором тестов) для оценки производительности непрерывных численных методов оптимального транспорта.

Обоснованность и достоверность. Обоснованность и достоверность результатов работы обеспечивается корректным применением математического аппарата теории оптимального транспорта и смежных областей, а также обширным экспериментальным исследованием разработанных методов в ряде задач математического моделирования. Ко всем полученным теоретическим результатам приводятся строгие доказательства, а экспериментальные результаты сопровождаются детальными описаниями постановок экспериментов и программным кодом.

Для каждой из рассматриваемых в работе задач проводится достаточно полный обзор релевантной научной литературы, включающий последние разработанные методы в рассматриваемой области. Для каждой из задач подробно описываются недостатки их существующих решений, объясняются причины этих недостатков. При выводе новых методов обосновывается, как именно эти недостатки устраняются, какие преимущества имеют разработанные методы по сравнению с существующими.

Работа написана на высоком математическом уровне и содержит ряд нетривиальных математических результатов, обосновывающих разработанные вычислительные алгоритмы. В диссертации корректно вводятся переменные и выражения, для теоретических результатов приводятся их четкие формулировки с необходимыми условиями и предположениями. Все доказательства теоретических результатов достаточно строгие и подробные. Все переходы и выводы в доказательствах пояснены, что упрощает процесс чтения и анализ результатов.

Для всех разработанных алгоритмов в диссертации приводятся их детальные описания (численные процедуры) и перечни использованных гиперпараметров (архитектуры нейронных сетей, оптимизаторы, размеры выборок, число итераций обучения и пр.). Для используемых в экспериментах наборов данных приводятся ссылки на первоисточники. Для всех разработанных алгоритмов в диссертации приводятся ссылки на публичные репозитории автора диссертации, содержащие открытые исходные коды разработанных программ с их реализацией. Эти факторы обеспечивают воспроизводимость вычислительных экспериментов, проведенных в исследовании.

Апробация и публикации. Результаты были доложены автором на трёх ведущих международных конференциях по машинному обучению и искусственному интеллекту (NeurIPS 2022, ICLR 2021, 2022). Результаты диссертации опубликованы в пяти работах в трудах соответствующих конференций, 2 из работ индексируются системой Scopus. Так же результаты доложены на пяти научных семинарах и симпозиумах в России и за рубежом.

Автореферат полностью и точно отражает содержание диссертации. Диссертационное исследование посвящено разработке новых параметрических методов вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров и соответствует паспорту специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

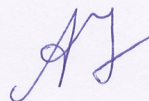
Замечания. Существенных замечаний по работе нет. Укажем лишь, что дополнительно в заключении работы интересно было бы увидеть более подробное обсуждение, как методы, разработанные в данной работе для Вассерштейн-2 метрики, могут быть адаптированы к вычислению оптимального транспорта с более общими функциями транспортной стоимости.

Заключение. Диссертация Коротина А.А. «Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров» выполнена на высоком научном уровне, представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, посвященную актуальной и активно развиваемой тематике, соответствует требованиям «Положения о порядке присуждения ученых степеней».

Диссертант Коротин Александр Андреевич заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Отзыв ведущей организации на диссертацию обсуждён и одобрен на расширенном заседании кафедры математических основ управления Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» 20 января 2023г., протокол № 4.

Заведующий кафедрой математических основ
управления, профессор,
доктор физ.-мат. наук, доцент



Гасников Александр Владимирович

Организация – место работы: федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)», кафедра математических основ управления

Должности: заведующий кафедрой, профессор

Почтовый адрес: 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

Телефон: 8 (495) 408 72 90

Адрес электронной почты: mou@mail.mipt.ru

Web-сайт организации: <https://mipt.ru>