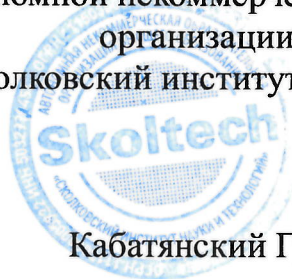


УТВЕРЖДАЮ
Вице-президент по науке и академическим связям
автономной некоммерческой образовательной
организации высшего образования
«Сколковский институт науки и технологий»,
д.ф.-м.н., профессор.



Кабатянский Григорий Анатольевич

«12» декабря 2022 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

автономной некоммерческой образовательной организации высшего
образования «Сколковский институт науки и технологий»

Диссертация «Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров» прошла апробацию на заседании научного семинара Центра прикладного искусственного интеллекта Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий».

В период подготовки диссертации с 2018 г. по 2022 г. соискатель **КОРОТИН Александр Андреевич** обучался в очной аспирантуре Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» по специальности 1.2.2 «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» по направлению подготовки 09.06.01 «Информатика и вычислительная техника». Работал в Сколтехе в Центре по научным и инженерным вычислительным технологиям для задач с большими массивами данных в должности стажера-исследователя.

В 2018 г. Коротин А. А. окончил очную магистратуру федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет “Высшая школа экономики”» по направлению подготовки 01.04.02 «Прикладная математика и информатика».

В 2022 г. Коротин А.А. окончил очную аспирантуру автономной некоммерческой образовательной организации высшего профессионального образования «Сколковский институт науки и технологий» по направлению

09.06.01 «Информатика и вычислительная техника» с присвоением квалификации «Исследователь. Преподаватель-исследователь».

Справка о сдаче кандидатских экзаменов выдана в 2022 г. Автономной некоммерческой образовательной организацией высшего образования «Сколковский институт науки и технологий».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент, Бурнаев Евгений Владимирович. Основное место работы – Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий», руководитель Центра прикладного искусственного интеллекта.

По итогам обсуждения диссертации «Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров» **принято следующее заключение:**

Тема диссертации, посвященной разработке новых численных методов математического моделирования на основе оптимального транспорта (ОТ), **является актуальной**, поскольку в наши дни численные методы ОТ широко применяются в практических задачах математического моделирования для синтеза искусственных данных (построения генеративных моделей данных), доменной адаптации данных, обработки изображений (улучшения качества, устранения шума, передаче цвета/стиля) и других целей. Несмотря на значительные достижения в вычислительном ОТ за последнее десятилетие, существующие вычислительные методы решения задач ОТ по-прежнему обладают рядом критических недостатков, ограничивающих их эффективное применение в вышеупомянутых задачах моделирования.

Большинство методов в области вычислительного ОТ предназначены для данных, описываемых дискретными вероятностными распределениями. Однако эти методы не могут обеспечить точную и вычислительно эффективную аппроксимацию решения задачи ОТ для данных высокой размерности, имеющих непрерывные распределения, поскольку для этого необходимы большие размеры выборок, недоступные, как правило, в прикладных задачах.

В последние годы для решения задач ОТ все чаще применяется машинное обучение. Построение математических моделей на основе глубоких нейронных сетей для параметризации транспортных отображений позволяет масштабировать применения ОТ на высокоразмерные пространства и практические задачи, в которых дискретные методы работают неудовлетворительно. Численные непрерывные (параметрические) методы ОТ условно делятся на две группы: методы на основе энтропийной регуляризации и минимаксные методы. Однако энтропийные методы,

использующие регуляризацию, находят решение задачи ОТ, которое смещено относительно истинного решения, что ведет к большой ошибке решения задачи ОТ и усложняет использование методов на практике. Минимаксные методы требуют решения задачи поиска седловой точки некоторого функционала, и на практике такая оптимизация может быть неустойчивой, что усложняет процесс обучения с использованием этих методов.

Таким образом, существует необходимость разработки новых численных методов, которые позволили бы находить решения непрерывных задач ОТ в больших размерностях без смещения и без решения минимаксной задачи оптимизации. Для оценки точности таких методов требуется также разработка количественной методики тестирования таких методов вычисления ОТ.

Целью диссертационной работы является разработка математических моделей непрерывного оптимального транспорта с квадратичной функцией стоимости (называемой Васерштейн-2 метрикой) для применения в прикладных задачах математического моделирования с использованием общего подхода на основе нейронных сетей, включая задачи вычисления ОТ отображения и расстояния между непрерывными вероятностными распределениями, нахождение барицентров семейств вероятностных распределений и вычисление градиентных потоков функционалов на пространстве вероятностных распределений. Для достижения поставленных целей были поставлены и решены следующие **задачи**:

1. Разработать численный метод на основе двойственной формулировки ОТ для поиска Васерштейн-2 оптимальных отображений между непрерывными распределениями с помощью нейросетей; получить теоретические оценки того, как связаны ошибки аппроксимации решений предложенной двойственной и исходной задач.
2. Разработать численный метод на основе двойственной формулировки ОТ для поиска Васерштейн-2 барицентров семейства непрерывных распределений с помощью нейронных сетей; получить теоретические оценки того, как связаны ошибки аппроксимации решений предложенной двойственной и исходной задач.
3. Разработать численный метод на основе дискретизации времени и нейронных сетей для моделирования Васерштейн-2 градиентных потоков функционалов на пространстве распределений.
4. Разработать методологию для количественного сравнения непрерывных методов ОТ; предложить и математически обосновать метод создания эталонных пар непрерывных распределений с аналитически известным Васерштейн-2 ОТ отображением.

Основные результаты диссертации:

1. Предложен алгоритм для вычисления Васерштейн-2 оптимального отображения и расстояния между непрерывными распределениями, базирующийся на нейронных сетях с выпуклой по входу архитектурой и на применении разработанной циклической регуляризации в двойственной задаче. Получены теоретические оценки, связывающие ошибку минимизации разработанного целевого функционала с ошибкой решения исходной задачи нахождения оптимального отображения.
2. Предложен алгоритм для вычисления Васерштейн-2 барицентра семейства непрерывных распределений, базирующийся на нейросетях с выпуклой по входу архитектурой и на использовании разработанных методов циклической регуляризации и регуляризации на конгруэнтность двойственных переменных задачи поиска барицентра. Получены теоретические оценки, связывающие ошибку минимизации разработанного целевого функционала с ошибкой решения исходной задачи нахождения барицентра.
3. Предложен численный 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.

Алгоритмы, методы и оценки, полученные в результатах 1-3, позволили расширить класс задач математического моделирования, решаемых с использованием численных методов оптимального транспорта на основе нейронных сетей.

4. Разработана методология на основе нейронных сетей с выпуклой по входу архитектурой для синтеза пар непрерывных распределений с аналитически известным ОТ отображением между ними. Разработанная методология позволила устранить имеющийся пробел в тестировании непрерывных методов решения задачи ОТ и исследования математических моделей, на которых они основаны.

Научная новизна работы заключается в том, что в ней:

1. Впервые предложен масштабируемый метод вычисления Васерштейн-2 оптимальных отображений между непрерывными распределениями в пространствах большой размерности, который состоит из одного этапа обучения и не требует минимаксной оптимизации. В основе метода лежит новый подход на основе введения нового циклического регуляризатора в двойственную постановку задачи ОТ и использования

нейросетей с выпуклой по входу архитектурой. В отличие от существующих регуляризаторов, циклический регуляризатор не вносит смещение в решение задачи.

2. Впервые предложен масштабируемый метод вычисления Васерштейн-2 барицентров непрерывных вероятностных распределений, который состоит из одного этапа обучения и не требует минимаксной оптимизации. В основе подхода лежит комбинация описанного выше циклического регуляризатора, нового регуляризатора на конгруэнтность решений двойственной задачи и выпуклых по входу нейронных сетей. В отличие от существующих регуляризаторов, предложенная комбинация не вносит смещение в решение.
3. Впервые предложен масштабируемый численный метод для моделирования Васерштейн-2 градиентных потоков на пространстве высокоразмерных вероятностных распределений с помощью выпуклых по входу нейронных сетей. Метод использует теоретическую итеративную схему дискретизации градиентного потока по времени (так называемую схему ЖКО), для которой ранее не были известны эффективные численные методы для её реализации в пространствах высокой размерности.
4. Предложена оригинальная методология синтеза пар многомерных непрерывных вероятностных распределений, для которых аналитически известно эталонное Васерштейн-2 транспортное отображение между ними. Разработанная методология и предложенные пары распределений позволяют сравнивать непрерывные численные методы ОТ в больших размерностях и устраняют недостатки существующих методик, связанных с узостью классов используемых тестовых распределений и не позволяющих объективно оценивать качество численных методов ОТ.

Теоретическая значимость работы заключается в том, что предложенные новые подходы на основе нейронных сетей и численных методов ОТ позволяют эффективно решать ряд задач математического моделирования, избавляясь от недостатков существующих подходов таких как использование численно нестабильной минимаксной оптимизации или наличие систематических ошибок в решении. Принципиальной особенностью предложенных подходов является то, что разработанные в работе решения для не требуют минимаксной оптимизации и не смещают оптимальное решение задачи, что приводит к более вычислительно эффективному и точному нахождению решения по сравнению с существующими численными методами ОТ на основе нейронных сетей. В

частности, эти улучшения значительно упрощают теоретический анализ полученных решений, и, как следствие, позволяют выводить оценки ошибки оптимизации по ограниченному классу функций, например, представленному нейросетями.

Практическая значимость. Предложенные подходы математического моделирования на основе нейронных сетей и численных методов ОТ имеют потенциал для решения практически важных научно-исследовательских и промышленных задач. Например, разработанный метод, протестированный в задачах доменной адаптации и переноса стиля на искусственных и модельных данных, имеет ряд потенциальных приложений в задачах компьютерного зрения, таких как обучение моделей для улучшения разрешения изображений, устранения шума и пр. Другим возможным применением разработанных подходов является агрегация данных из нескольких источников, например, медицинских сканеров разных производителей, что позволит улучшить качество моделей классификации и сегментации медицинских изображений, построенных на них.

Обоснованность и достоверность результатов и выводов обеспечивается корректностью применения апробированного в научной практике математического аппарата теории оптимального транспорта и других смежных теоретических областей, а также экспериментальной проверкой разработанных численных методов на большом количестве модельных и практических задач оптимального транспорта. Полученные теоретические результаты обосновываются математически строгими доказательствами, а для проведенных вычислительных экспериментов даются детальные описания, обеспечивающие их воспроизводимость. Результаты опубликованы в трудах ведущих международных конференций по машинному обучению и искусственному интеллекту.

Материалы диссертации полностью опубликованы автором в 5 статьях в трудах **Core rank A*** ведущих международных конференций по машинному обучению и искусственному интеллекту:

В изданиях, индексируемых Scopus:

1. **Korotin, A.**, Li, L., Genevay, A., Solomon, J. M., Filippov, A., & Burnaev, E. Do neural optimal transport solvers work? a continuous wasserstein-2 benchmark // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2021. — Vol. 34. — P. 14593—14605.
2. Mokrov, P., **Korotin, A.**, Li, L., Genevay, A., Solomon, J. M., & Burnaev, E. Large-scale wasserstein gradient flows // Advances in Neural Information Processing Systems. — 2021. — Vol. 34. — P. 15243—15256.

В трудах конференций:

3. **Korotin, A.**, Egiazarian, V., Asadulaev, A., Safin, A., & Burnaev, E. Wasserstein-2 Generative Networks // International Conference on Learning Representations. — 2021. [Электронный ресурс] URL: https://openreview.net/pdf?id=bEoxzW_EXsa (дата обращения 29.11.2022)
4. **Korotin, A.**, Li, L., Solomon, J., & Burnaev, E. Continuous Wasserstein-2 Barycenter Estimation without Minimax Optimization // International Conference on Learning Representations. — 2021. [Электронный ресурс] URL: <https://openreview.net/pdf?id=3tFAs5E-Pe> (дата обращения 29.11.2022)
5. Rout, L., **Korotin, A.**, & Burnaev, E. Generative Modeling with Optimal Transport Maps // International Conference on Learning Representations. — 2022. [Электронный ресурс] URL: <https://openreview.net/pdf?id=5JdLZg346Lw> (дата обращения 29.11.2022)

Личный вклад соискателя. Все результаты, выносимые на защиту, получены автором лично. Все алгоритмы и теоретические результаты, приведенные в диссертации и опубликованные в работах [1-5], сформулированы и обоснованы непосредственно автором диссертации. В диссертации приводятся иллюстративные результаты совместных исследований с соавторами: экспериментальное тестирование метода для нахождения ОТ отображения [3] проведено совместно с соавторами В. Егизаряном, А. Асадулаевым и А. Сафиним; тестирование метода для вычисления барицентров [4] проведено совместно с соавтором Л. Ли; автор диссертации осуществил предварительную реализацию и тестирование разработанного метода для вычисления градиентных потоков [2]; адаптация кода для рассматриваемых в экспериментальной части практических задач сравнения с альтернативными подходами осуществлена соавтором П. Мокровым; все вычислительные эксперименты в работе [1] осуществлены непосредственно автором диссертации, а в работе [5] -- соавтором Л. Роут.

Основные результаты работы докладывались на следующих научных конференциях и семинарах:

на 3 ведущих международных научных конференциях ранга А* (суммарно 5 докладов) по машинному обучению и искусственному интеллекту:

1. The 9th International Conference on Learning Representations (ICLR 2021, Core A*, онлайн) -- 2 презентации по [3,4];
2. The 35th Conference on Neural Information Processing Systems (NeurIPS 2021, Core A*, онлайн) -- 2 презентации по [1, 2];
3. The 10th International Conference on Learning Representations (ICLR 2022, Core A*, онлайн) -- 1 презентация по [5];

на 5 следующих научных семинарах по машинному обучению и искусственному интеллекту:

1. Huawei Machine Learning Workshop (2019, Сочи, Россия);
2. Семинар по байесовским методам (2020, НИУ ВШЭ, онлайн);
3. Geometry Data Processing Group Seminar (2020, MIT, онлайн);
4. SMILES Machine Learning Summer School (2020, онлайн);
5. Math of Machine Learning Summer School (2020, Сочи, Россия).

За научные результаты, включая результаты диссертации, автор в 2019 и 2021 годах становился лауреатом **премии** им. Ильи Сегаловича для поддержки молодых исследователей в области машинного обучения и искусственного интеллекта от компании Яндекс.

Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, в частности, пунктам:

1. Результаты 1-3 соответствуют **п.1** “Разработка новых математических методов моделирования объектов и явлений”, **п.3** “Разработка, обоснование и тестирование эффективных вычислительных методов с применением современных компьютерных технологий” и **п.4** “Реализация эффективных численных методов и алгоритмов в виде комплексов проблемно-ориентированных программ для проведения вычислительного эксперимента”.
2. Результат 4 соответствует **п.2** “Развитие качественных и приближенных аналитических методов исследования математических моделей”.

Диссертация **КОРОТИНА Александра Андреевича** «Параметрические методы вычисления оптимальных транспортных отображений, расстояний и барицентров» является законченной научно-квалификационной работой. Диссертация выполнена на важную и актуальную тему, все выносимые на защиту научные положения получены автором лично, являются новыми, обладают теоретической и практической значимостью. Диссертация рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности **1.2.2 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ**.

Апробация диссертации проведена на заседании научного семинара Центра прикладного искусственного интеллекта Сколтеха. Присутствовали: д.ф.-м.н. Кабатянский Г.А., д.ф.-м.н. Бернштейн А. В., д.ф.-м.н. Бурнаев Е. В., к.ф.-м.н. Вановский В. В., к.ф.-м.н. Трофимов И.Е., к.ф.-м.н. Ланге А.М., Войнов О. Я., Газдиева М. Д., Мокров П. В., Гущин Н. С., Егизарян В. Г., Бутаков И. Д., Асадулаев А. А.

Заключение принято голосованием участников заседания. Присутствовало на заседании **13** человек. Результаты голосования: «за» – **13**

чел., «против» – нет, «воздержались» – нет, протокол №1 от 30 ноября 2022 года.

Председатель заседания, профессор Центра
прикладного искусственного интеллекта
Сколтеха, д.ф.-м.н., профессор



Бернштейн А.В.