

**ОТЗЫВ официального оппонента
на диссертацию на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
Щербаковой Елены Михайловны
на тему: «Матричные и тензорные разложения с условием
неотрицательности и их применение»
по специальности 1.2.2 Математическое моделирование, численные
методы и комплексы программ**

Актуальность диссертационной работы. Малопараметрические представления матриц и тензоров позволяют эффективно хранить информацию, могут помочь в выделении признаков и связей в исходных данных, а также дают возможность быстрее проводить вычисления с объектами. Представляется естественным требование сохранения неотрицательности факторизации при работе с неотрицательными данными. Однако даже задача неотрицательной факторизации матриц является NP-трудной, при этом известные алгоритмы неотрицательной факторизации матриц и тензоров используют для разложения все элементы исходных объектов и, соответственно, обладают высокой вычислительной сложностью. Диссертация Щербаковой Е. М. посвящена разработке, исследованию и программной реализации эффективных алгоритмов для неотрицательной факторизации матриц и тензоров в задачах, связанных с обработкой больших данных.

Новизна научной работы. В диссертационной работе предложен алгоритм решения задачи неотрицательной факторизации сепарабельных матриц и матриц ранга 2, сложность которого линейно зависит от размеров матрицы; исследован вопрос, насколько точным является решение при применении метода к зашумленным сепарабельным матрицам.

В части неотрицательной тензорной факторизации предложены два метода для построения неотрицательного тензорного произведения, для первого показано, что всегда можно построить разложение заданной точности. Предложенный Щербаковой Е. М. подход двухэтапной факторизации, когда

работа ведется с малоранговым представлением исходного тензора (без условия неотрицательности), позволяет существенно снизить вычислительную сложность работы алгоритмов, причем формат разложения не ограничивается тензорным поездом, подход применим к каноническому разложению и разложению Таккера. В работе рассматривается также метод приведения разложения в тензорный поезд (без требования неотрицательности) к неотрицательному путем точечного исправления отрицательных элементов.

Исследовано применение неотрицательного тензорного поезда в задаче ранжирования узлов многомерного графа, написан программный комплекс на языке Matlab, предложенные методы протестированы на реальных данных и применительно к задаче математического моделирования, основанной на решении мультикомпонентного уравнения Смолуховского.

Степень обоснованности положений, выносимых на защиту, научных выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации. Достоверность результатов следует из строгости математических рассуждений и согласуется с численными экспериментами. Основные результаты по теме диссертации изложены в 5 печатных изданиях, изданных в журналах Scopus, WoS, RSCI, а также в изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальности, и докладывались на российских и международных конференциях.

Краткое содержание диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав и заключения.

В первой главе Щербакова Е. М. представляет решение задачи неотрицательной матричной факторизации для сепарабельных матриц с доказательством, что время работы предложенных алгоритмов линейно зависит от размеров матрицы. Матрица называется сепарабельной, если все ее столбцы принадлежат конусу, натянутому на некоторые r столбцов (называемые определяющей системой) той же матрицы. Сепарабельные матрицы, в частности, используются при работе с гиперспектральными

изображениями или текстами. Предлагаемый алгоритм представляет собой модификацию алгоритма Гиллиса-Вавасиса, которая работает с некоторой факторизацией исходной матрицы без предположения о неотрицательности факторов, при этом полный массив элементов исходной матрицы не требуется и за счет этого новый алгоритм обладает существенно меньшей вычислительной сложностью. Дополнительно демонстрируется, что матрицы ранга не выше 2 также являются сепарабельными матрицами. Отдельно исследуется случай зашумленных сепарабельных матриц, выводится оценка, с какой точностью предложенный алгоритм находит определяющую систему в зависимости от величины возмущений.

Вторая глава посвящена неотрицательной факторизации тензоров. Особое внимание автор уделяет разложению в неотрицательный тензорный поезд как достаточно малоизученному, предлагаются два метода. Идея первого (NTTF) заключается в последовательной неотрицательной факторизации матриц-разверток и заполнении вагонов тензорного поезда полученными факторами. Для данного метода приводится оценка точности разложения. Вторым алгоритмом (NTT-MU) основан на идее чередующихся наименьших квадратов, когда некоторое изначальное приближение последовательно меняется путем применения правил мультипликативных обновлений для каждого вагона так, чтобы уменьшить ошибку аппроксимации. Определение рангов для построения разложения является, вообще говоря, нетривиальной задачей, и их значения могут существенно влиять на качество аппроксимации. Щербакова Е. М. рассматривает применение техники DMRG в рамках второго алгоритма, что позволяет адаптировать неотрицательные ранги ТТ для большей точности разложения. Ускорение вычислений происходит за счет идеи двухэтапной факторизации, благодаря этому подходу сложность итерации метода NTT-MU при построении разложения для тензора с n^d элементов линейно зависит от n . Автор отмечает, что идеи двухэтапной факторизации могут успешно применяться также для построения неотрицательных канонического

разложения и разложения Таккера, и демонстрирует на примере, как существующие алгоритмы могут быть переформулированы так, что сложность итерации снизится с $O(n^d)$ до линейной зависимости от n . В главе в том числе предлагается подход точечной коррекции элементов разложения неотрицательного тензора в формате тензорного произведения с целью получения неотрицательной факторизации.

В третьей главе изложено, как собственный вектор Перрона мультиоднородных отображений может использоваться для ранжирования узлов многомерного графа, который можно описать неотрицательным тензором перехода. При этом предлагается для ускорения вычислений использовать разложение в неотрицательный тензорный произведение, приводится оценка погрешности приближения.

Четвертая глава целиком посвящена численным экспериментам, исследуются скорость работы и точность методов, сравниваются алгоритмы и подходы применительно к различным приложениям.

Автореферат в полной мере передает содержание диссертации.

Замечания по диссертационной работе.

1. Неудачно использование термина “дивергенция Кульбека-Лейблера”, который следует переводить с английского как “отклонение Кульбека-Лейблера”.
2. В некоторых местах присутствуют неточности. Например: “Уравнение Смолуховского – математическая модель...”; в разделе 1.1 не определена используемая в оценках норма.
3. В работе автор упоминает модель мультилинейного Pagerank, модификации для цепей Маркова высокого порядка, где будущее состояние зависит от состояний на нескольких предыдущих шагах. Было бы полезно для ускорения вычислений мультилинейного Pagerank рассмотреть применение неотрицательного тензорного произведения.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляет значимости диссертационного исследования. Диссертация отвечает требованиям, установленным Московским государственным университетом имени М.В.Ломоносова к работам подобного рода. Содержание диссертации соответствует специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ (по физико-математическим наукам), а также критериям, определенным пп. 2.1-2.5 Положения о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В.Ломоносова, а также оформлена согласно требованиям Положения о совете по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Таким образом, соискатель Щербакова Елена Михайловна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2. Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры математической физики
МГУ имени М.В. Ломоносова

КРЫЛОВ Андрей Серджевич

21.03.2025 г.

Контактные данные:

тел.: 7(916)9440593, e-mail: kryl@cs.msu.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

05.13.18 - Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

Адрес места работы:

119991, г. Москва, Ленинские горы, д.1, факультет ВМК, кафедра
математической физики, Тел.: +7 (495) 939-11-029; e-mail: kryl@cs.msu.ru