

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. Диссертационная работа Щербаковой Е. М. посвящена методам неотрицательной факторизации матриц и тензоров и их применению. В настоящее время концепция неотрицательных матричных и тензорных разложений активно развивается, они применяются во множестве приложений, например в теории обработки сигналов, кластерном анализе, в задачах классификации, спектроскопии, при работе с изображениями и т. д. Более того, перечень приложений продолжает постоянно расширяться. Однако сама задача неотрицательной матричной факторизации в общем случае является NP-трудной, даже если неотрицательный ранг матрицы известен, поэтому возникает необходимость в методах, которые позволяют эффективно строить разложения в матричном и, конечно, тензорном случаях, особенно в связи с ростом числа задач большой размерности.

Новизна научной работы. В работе предлагаются алгоритмы решения задачи неотрицательной факторизации для определенных классов матриц. На практике предложенные методы используют число операций и объем памяти, линейно зависящие от суммы размеров исходной матрицы. В данной работе предлагаются два эффективных алгоритма построения неотрицательного тензорного поезда для аппроксимации исходного тензора с неотрицательными элементами, для одного из которых предложена модификация, которая позволяет подбирать ранги разложения в процессе выполнения алгоритма. Использование малоранговых приближений и быстрых алгоритмов линейной алгебры позволяет существенно ускорить расчеты. Исследуется вопрос точности аппроксимации, приведены оценки

алгоритмической сложности. Разработан метод построения аппроксимации тензора в виде неотрицательного тензорного поезда, где снято требование неотрицательности самих факторов, неотрицательными должны быть элементы итоговой аппроксимации. Рассмотрен ряд приложений, в частности ранжирование узлов многомерного графа. Все разработанные методы реализованы в виде программ, проведены численные эксперименты, демонстрирующие эффективность и точность предложенных методов.

Степень обоснованности положений, выносимых на защиту, научных выводов и рекомендаций, сформулированных в диссертации. Достоверность полученных результатов обеспечивается большим количеством дополняющих друг друга теоретических результатов и численных экспериментов. 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 предлагается быстрый метод решения задачи неотрицательной факторизации для неотрицательных сепарабельных матриц – тех, для которых существует конус, натянутый на несколько столбцов исходной матрицы и содержащий все ее столбцы. Основная идея – построить крестовое разложение исходной матрицы и преобразовать факторы так, чтобы в итоге велась работа над задачей меньшего размера. Исследован случай возмущенных сепарабельных матриц, в частности, выведены теоретические оценки точности работы алгоритма в зависимости от возмущения. Хотя уже было известно, что если ранг неотрицательной матрицы равен двум, то всегда можно построить неотрицательную факторизацию ранга 2, никто не приводил конкретного метода для решения данной задачи, как это делается в данной работе, используя на практике

число операций и элементов, линейно зависящее от суммы размеров исходной матрицы.

Первая часть второй главы посвящена методам декомпозиции в неотрицательный тензорный поезд. Автор предлагает алгоритм NTTF, идея которого заключается в последовательных разложениях матриц-разверток с применением методов неотрицательной матричной факторизации, за счет чего достигается выполнение условия поэлементной неотрицательности. Выведена оценка точности получаемой аппроксимации в формате TT.

Также предлагается алгоритм NTT-MU, в котором сначала инициализируется неотрицательный тензорный поезд, являющийся стартовым приближением исходного тензора, затем применяется правило мультипликативных обновлений, чтобы последовательно изменять один за другим вагоны, пока остальные считаются зафиксированными, при этом уменьшая относительную погрешность. Автору удалось существенно понизить вычислительную сложность за счет использования малоранговых разложений. С тем чтобы дать возможность определять неотрицательные ранги во время работы алгоритма, в работе предлагается метод, в котором NTT-MU комбинируется с техникой DMRG (Density Matrix Renormalization Group). Далее во второй главе рассматривается подход точечной коррекции элементов разложения неотрицательного тензора в тензорный поезд с помощью добавок ранга 1 с целью получения неотрицательной аппроксимации.

В предложенных автором алгоритмах ускорения удается достичь за счет того, что построение декомпозиции проводится в два этапа: изначально строится разложение исходного объекта (матрицы или тензора) без требования неотрицательности, а при построении неотрицательной факторизации работа ведется с малоранговым представлением вместо исходного объекта. Как показано в диссертации, данный подход в части неотрицательных тензорных разложений применим не только для формата тензорного поезда, но и канонического разложения, а также разложения Такскера.

В третьей главе рассматривается следующее приложение для применения неотрицательного тензорного поезда – ранжирование узлов многомерного графа с помощью перронова вектора мультиоднородного отображения. Приводится необходимая теория, выводится оценка, как использование аппроксимации тензора вместо исходного объекта влияет на результат ранжирования.

Четвертая глава посвящена результатам численных экспериментов. Проверяются и подтверждаются оценки скорости сходимости и времени работы численных алгоритмов, в качестве приложений рассмотрены гиперспектральные изображения, тензор ERP (event related potential – электрофизиологический отклик на стимул), ядра уравнения Смолуховского и ранжирование вершин многомерного графа. Отмечается, что алгоритмы, предложенные в диссертации, уже успешно применяются для вычисления неотрицательного решения уравнения Смолуховского, сжатия видео и изображений с запуском на нескольких процессорах.

Автореферат в полной мере передает содержание диссертации.

Замечания по диссертационной работе.

- Лучше употреблять термин «перронов вектор» вместо «вектор Перрона».
- В работе есть небольшое количество опечаток, которые в целом не влияют на читаемость текста.
- Предложенный автором двухэтапный подход дает возможность преобразования большинства алгоритмов для неотрицательной факторизации с целью снижения вычислительной сложности, интересным представляется сравнение их производительности и точности, данный вопрос можно рассмотреть как тему для будущих исследований.

Вместе с тем, указанные замечания не умаляют 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, главный научный сотрудник ФГБУН «Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН» лаборатории математической экологии,

ЛОГОФЕТ Дмитрий Олегович



21.03.2025

Контактные данные:

тел.: 7(916)6286229, e-mail: danilal@postman.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом
защищена диссертация:

03.01.02 – Биофизика

Адрес места работы:

119017, Москва, Пыжевский пер., д. 3, Институт физики атмосферы им.
А.М. Обухова РАН, Лаборатория математической экологии
Тел.: 7(916)6286229; e-mail: danilal@postman.ru

Подпись сотрудника ФГБУН «Институт физики атмосферы им. А.М. Обухова РАН»
удостоверяю:

Члены жюри
к. ф. н.



Киселева Ю. В.

21.03.2025