Метрический анализ пространства параметров глубоких нейросетей

Эрнест Р. Насыров

nasyrov.rr@phystech.edu

Исследуется проблема снижения размерности пространства параметров модели машинного обучения. Решается задача восстановления временного ряда. Для восстановления используются авторегресионные модели: линейные, автоенкодеры, реккурентные сети — с непрерывным и дискретным временем. Проводится метрический анализ пространства параметров модели. Предполагается, что отдельные параметры модели, случайные величины, собираются в векторы, многомерные случайные величины, анализ взаимного расположения которых в пространстве и представляет предмет исследования данной работы. Этот анализ снижает число параметров модели, оценивает значимости параметров, отбирая их. Для определения положения вектора параметров в пространстве оцениваются его матожидание и матрица ковариации с помощью методов *бутстрэпа* и *вариационного вывода*. Эксперименты проводятся на задачах восстановления синтетических временных рядов, квазипериодических показаний акселерометра, периодических видеоданных. Для восстановления применяются модели SSA (singular spectrum analysis), нелинейного PCA (principal component analysis), RNN (reccurent neural network), Neural ODE (neural ordinary differential equations).

Ключевые слова: *Временные ряды; снижение размерности; релевантность параметров; пространство параметров; выбор модели.*

1 Introduction

Ключевые слова: временные ряды, снижение размерности, релевантность параметров, пространство параметров, выбор модели.

Высокоразмерные данные избыточны, что представляет сложность для их эффективной обработки и использования. В работе решается задача снижения размерности признакового описания объекта. Ее базовый принцип состоит в том, чтобы отобразить высокоразмерное признаковое пространство в низкоразмерное, сохраняя важную информацию о данных [Jia et al., 2022].

На текущий момент известно много методов снижения размерности данных. В работе [Örnek and Vural, 2019] снижения размерности достигается за счет построения дифференцируемой функции эмбеддинга в низкоразмерное представление, а в [Cunningham and Yu, 2014] обсуждаюся линейные методы. В работе [Isachenko and Strijov, 2022] задача снижения размерности решается для предсказания движения конечностей человека по электрокортикограмме с использованием метода QPFS (quadratic programming feature selection), учитывающем мультикоррелированность и входных, и целевых признаков.

Наряду с задачей снижения размерности входных данных стоит задача выбора оптимальной структуры модели. В случае оптимизации структуры нейросети, большое внимание уделено изучению признакового пространства модели. В работах [Hassibi et al., 1993] и [Dong et al., 2017] применяется метод OBS (Optimal Brain Surgeon), состоящий в удалении весов сети с сохранением ее качества аппроксимации, причем выбор удаляемых весов производится с помощью вычисления гессиана функции ошибки по весам.

В статье [Грабовой et al., 2019] приводится метод первого порядка, решающий задачу удаления весов, основанный на нахождении дисперсии градиента функции ошибки по параметру и анализе ковариационной матрицы параметров, а в статье Грабовой et al. [2020] нерелевантные веса не удаляют, а прекращают их обучение.

Приведенные выше задачи снижения размерности данных и выбора оптимальной структуры нейросети основаны на исследовании пространства входных данных и пространства признаков соответственно. Существенный недостаток предыдущих работ состоит в том, что в них анализируются *отдельные* параметры (скаляры) моделей и их взаимозависимость. Тем самым не учитывается, что на входные данные действуют *вектора* параметров посредством скалярных произведений, то есть упускается из виду простая *структура* преобразования.

В данной работе решается задача восстановления временного ряда, в рамках которой исследуем проблему снижения размерности пространства параметров модели. Снижение размерности основано на анализе сопряженного пространства ко входному. Оно связывает входное пространство и пространство параметров.

Данное исследование в большой степени полагается на простоту устройства глубоких нейросетей, которые являются композицией линейных и простых нелинейных функций (функций активации). Составной блок нейросети описан формой:

$$y = \sigma(\mathsf{W}x + b),\ y, b \in \mathbb{R}^m,\ x \in \mathbb{R}^n,\ \mathsf{W} \in \mathbb{R}^{m \times n},\ \sigma : \mathbb{R} \to \mathbb{R}.$$

Раньше элементы W_{ij} исследовались по-отдельности, как скаляры. Авторы работы предлагают изучать их как векторы-строки

$$\mathbf{w}_1, \dots, \mathbf{w}_m : \mathsf{W} = \begin{pmatrix} \mathbf{w}_1^\mathsf{T} \\ \dots \\ \mathbf{w}_m^\mathsf{T} \end{pmatrix}.$$

В нейросети эти строки обычно называются *нейронами*. В SSA $\sigma = Id$, а матрица $\mathsf{W} = \mathsf{W}_k$ это приближение истинной матрицы фазовых траекторий X (матрицы Ганкеля) суммой k элементарных матриц.

Обозначим $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_N]^\mathsf{T}, x_i \in \mathbb{R}$ — временной ряд, $1 \leqslant n \leqslant N$ — ширина окна. Точка $\mathbf{x}_t = [x_t, \dots, x_{t+n-1}]^\mathsf{T}$ является точкой фазовой траектории временного ряда в траекторном пространстве $\mathbb{H}_\mathbf{x} \subset \mathbb{R}^n$.

Предполагается, что каждая точка фазовой траектории распределена нормально вокруг своего матожидания. Тогда и временной ряд является случайным, поэтому результат обучения модели на нем, то есть параметры обученной модели, будут случайными.

В работе исследуется положение случайных векторов параметров модели $\mathbf{w}_i$ в метрическом пространстве. С помощью методов бутстрэпа и вариационного вывода [Hastie et al., 2009] оцениваются их матожидания $\mathbf{e}_i = \mathsf{E}(\mathbf{w}_i)$ и ковариационные матрицы $\mathsf{D}(\mathbf{w}_i) = \mathbf{A}_i^{-1}$. Мы работаем в гипотезе, что эти векторы $\mathbf{w}_i$ распределены нормально, таким образом пара $(\mathbf{e}_i, \mathbf{A}_i^{-1})$ полностью описывает вероятностное распределение вектора $\mathbf{w}_i$.

В качестве графического анализа пространства изображаются положения этих векторов как смеси гауссианов. На рис. 1 изображены плотности функции распределения трех гауссовских векторов (вертикальная ось) в зависимости от их положения на плоскости. В каждой точке плотность равна сумме плотностей трех распределений, отнормированная таким образом, чтобы площадь под графиком равнялась 1. Точкам максимума куполов распределения соответствуют матожидания векторов, а их форма определяется матрицей ковариации A (добавить стиль). Таким образом, чем ниже и шире 'купол', тем больше дисперсия и наоборот.

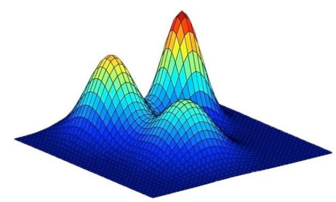


Рис. 1 Смесь гауссианов трех 2-х мерных векторов.

На рис. 2 изображены эллипсы, соответствующие 95% доверительным областям для гауссовских векторов в 3-х мерном пространстве. Чем больше ширина эллипса вдоль направления, тем больше дисперсия вектора по этому направлению.

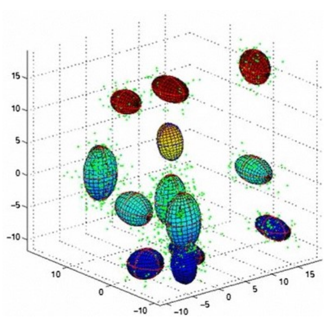


Рис. 2 Доверительные области 3-х мерных векторов.

Уменьшение размерности достигается за счет метрического анализа пространства векторов-параметров путем отбора релевантных строк (с малой дисперсией), замены мультикоррелирующих строк на их линейную композицию с помощью обобщения алгоритма QPFS, изучения структуры сообществ строк.

В качестве базовых моделей используются SSA ([Golyandina et al., 2001]), нелинейный PCA, RNN ([Bronstein et al., 2021]), VAE ([Kingma et al., 2019]) и Neural ODE ([Chen et al., 2018]).

Задача восстановления временного ряда решается на синтетических данных зашумленного sin, данных показания акселерометра в датасете MotionSense3 [Malekzadeh et al., 2018], периодичных видеоданных.

2 Problem statement

Пусть имеется множество из m временных рядов $\mathcal{S} = \{\mathbf{s}_1, \ldots, \mathbf{s}_m\}, \mathbf{s}_i = [\mathbf{s}_i^1, \ldots, \mathbf{s}_i^T], \mathbf{s}_i^j \in \mathbb{R}$, где n — длина сигналов. Каждый временной ряд — последовательность измерений величины в течение времени.

Definition 1. *Временное представление [убрать слово представление! термин занят]* $\mathbf{x}_t = [\mathbf{s}_1^t, \ldots, \mathbf{s}_m^t]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^m$ *состоит из измерений временных рядов в момент времени* t.

Definition 2 (Представление - вычеркнуть)**.** *предыстории длины* h *для момента времени* t *множества временных рядов* $\mathcal{S}$ *— это матрица* $\mathbf{X}_{t,h} = [\mathbf{x}_{t-h+1}, \ldots, \mathbf{x}_t]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{h \times m}$.

Definition 3. *Представление горизонта прогнозирования длины* p *для момента времени* t *множества временных рядов* $\mathcal{S}$ *— это матрица* $\mathbf{Y}_{t,p} = [\mathbf{x}_{t+1}, \ldots, \mathbf{x}_{t+p}]^\mathsf{T}$.

Definition 4. *Прогностическая модель* $\mathbf{f}^{\mathsf{AR}} : \mathbb{R}^{h \times m} \to \mathbb{R}^{p \times m}$ *является авторегрессионной моделью, которая по представлению предыстории* $\mathbf{X}_{t,h}$ *предсказывает представление горизонта планирования* $\mathbf{Y}_{t,p}$.

Решается задача авторегрессионного декодирования. Она состоит в построении прогностической модели $\mathbf{f}^{\mathsf{AR}}$, дающий *представление горизонта прогнозирования* множества временных рядов по *представлению предыстории* того же множества рядов. В дальнейшем будем считать, что восстанавливаем 1 временной ряд, что есть что $m = 1$.

Обозначим множество всех одномерных временных рядов через $\mathbb{S}$:

$$\mathbb{S} = \bigcup_{n=1}^{+\infty} \{[s_1, \ldots, s_n] \in \mathbb{R}^n\}.$$

Тогда прогностическая модель это функция $f^{\mathsf{AR}} : \mathbb{S} \to \mathbb{R}$. Изначальный временной ряд $\mathbf{s} = [s_1, \ldots, s_T]$ делится на две части $\mathbf{s} = [\mathbf{s}^H | \mathbf{s}^T], \mathbf{s}^H = [s_1, \ldots, s_h], \mathbf{s}^T = [s_{h+1}, \ldots, s_T]$. Задача состоит в том, чтобы предсказать $\mathbf{s}^T$ с максимальной точностью. Предсказание происходит следующим образом:

1. С помощью модели f предсказывается $\hat{s}_{h+1}$.
2. Предсказанный элемент $\hat{s}_{h+1}$ вместе с исходным временным рядом $\mathbf{s}^H$ подаются на вход f для предсказания $\hat{s}_{h+2}$.
3. Шаги $1-2$ повторяются, пока не будет предсказан весь $\hat{\mathbf{s}}^T = [\hat{s}_{h+1}, \ldots, \hat{s}_T]$.

Для упрощения нотации обозначим $f(\mathbf{s}^H) = \hat{\mathbf{s}}^T = [\hat{s}_{t+1}, \ldots, \hat{s}_T]$.

Модель $f = f(\mathbf{w}, \mathbf{s}), \mathbf{w} \in \mathbb{W}, \mathbf{s} = [s_1, \ldots, s_t] \in \mathbb{R}^t$ выбирается из некоего параметрического семейства. Параметры модели выбираются таким образом, чтобы минимизировать функцию ошибки $S = S(\mathbf{w}|\mathbf{s}, f)$:

$$\mathbf{w}^* = \arg\min_{\mathbf{w} \in \mathbb{W}} S(\mathbf{w}|\mathbf{s}, f).$$

В работе будет использоваться функция ошибки MSE, то есть

$$S(\mathbf{w}|\mathbf{s}, f) = \sum_{t=h+1}^{T} (\mathbf{s}_t - \hat{\mathbf{s}}_t)^2.$$

.

В качестве входных данных модели получают матрицу фазовых траекторий. Она строится по временному ряду $\mathbf{s} = [s_1, \ldots, s_T]$ и ширине окна h следующим образом:

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} s_1 & \ldots & s_k \\ s_2 & \ldots & s_{k+1} \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ s_h & \ldots & s_T \end{pmatrix} = \big[X_1 : \cdots : X_k\big], k = T - h + 1, X_i = [s_i, s_{i+1}, \ldots, s_{i+h-1}] \in \mathbb{R}^h.$$

Траекторная матрица является матрицей Ганкеля, так как каждая диагональ вида $i + j = const$ содержит одинаковые элементы. Векторы X_i являются точками фазовой траектории сигнала.

В качестве альтернативных моделей для восстановления временного ряда будем использовать 1) SSA, 2) двуслойную нейросеть с ортогональными линейными преобразованиями (нелинейный PCA), 3) RNN и 4) Neural ODE. Остановимся на каждой из них подробнее.

2.1 SSA

В модели SSA восстановление временного ряда получается за счет разложения матрицы фазовой траектории в сумму одноранговых матриц.

Далее вычисляются собственные значения и соответствующие собственным подпространствам ортонормированные системы векторов матрицы

$$\mathbf{S} = XX^T \in \mathbb{R}^{h\times h}.$$

Обозначим через

$$\lambda_1 \geqslant \ldots \geqslant \lambda_L \geqslant 0$$

собственные значения $\mathbf{S}$,

$$u_1, \ldots u_h$$

ортонормированную систему собственных векторов, соответствующую собственным значениям,

$$v_i = \frac{\mathbf{X}^T u_i}{\sqrt{\lambda_i}}\ (i = 1, \ldots, h).$$

Тогда

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 + \cdots + \mathbf{X}_d, \mathbf{X}_i = \sqrt{\lambda_i} u_i v_i^T$$

— SVD-разложение $\mathbf{X}$. Далее происходит группировка матриц $\mathbf{X}_i$, их ганкелизация и восстанавливается матрица сигнала

$$\hat{\mathbf{X}} = \tilde{\mathbf{X}}_{I_1} + \cdots + \tilde{\mathbf{X}}_{I_m},\ I_1 \sqcup \cdots \sqcup I_m \subset \{1, \ldots, h\},\ \tilde{\mathbf{X}}_I = hank\big(\sum_{i\in I} \mathbf{X}_i\big).$$

Где $\mathrm{hank}(X)$ — ганкелизация матрицы X, состоящая в том, что на каждой диагонали вида $i + j = const$ все элементы заменяются на их среднее арифметическое. Параметрами модели SSA являются множества $I_1, \ldots, I_m$.

2.2 Нейросеть

Модель двуслойной нейросети с ортогональными преобразованиями задается следующим образом:

$$\mathbf{f}(x) = \sigma(w^\mathsf{T} \cdot \sigma(W^\mathsf{T} x + b_1) + b_2),\ x \in \mathbb{R}^h,\ W \in \mathbb{R}^{h \times d},\ b_1 \in \mathbb{R}^h,\ b_2 \in \mathbb{R},\ w \in \mathbb{R}^d : w^T w = 1, WW^T = I.$$

Последние два условия гарантируют, что преобразования будет ортогональным. Здесь нейросеть предсказывает значение сигнала в следующий момент времени на основе его значения в предыдущие t моментов, где t — ширина окна. Нелинейность обеспечивается выбором функции активации $\sigma(x)$.

2.3 RNN

Модель RNN задается следующим образом:

$$h_t = \sigma(W \cdot h_{t-1} + V \cdot \mathbf{x}_t),$$

$$s_{t+1} = tanh(w_o^\mathsf{T} \cdot h_t),$$

где $h_t \in \mathbb{R}^d$ — скрытое состояние RNN в момент времени t, $W \in \mathbb{R}^{d \times d}, V \in \mathbb{R}^{d \times h}$.
$\mathbf{x}_t = [s_{t-h+1}, \ldots, s_t] \in \mathbb{R}^h$ - временной ряд, подающийся на вход модели, $w_o \in \mathbb{R}^d, s_{t+1} \in \mathbb{R}$ — прогноз значения сигнала в момент времени $t+1$. Параметрами модели являются матрицы W, V, w_0 а также начальное скрытое состояние h_0, которое мы зафиксируем $h_0 = 0$.

О входном временном ряде выдвинута гипотеза о том, что точки на фазовой траектории распределены по нормальному закону, то есть что $\mathbf{x}_t = [s_t, \ldots, s_{t+h-1}] \sim \mathcal{N}(\hat{\mathbf{x}}_t, \mathbf{B})$, где $\hat{\mathbf{x}}_t$ — это матожидание точки фазовой траектории в момент времени t, а $\mathbf{B}$ — матрица ковариации. Мы также предполагаем, что [ссылаться на формулу, где впервые введена W]$\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\hat{\mathbf{w}}, \mathbf{A})$.

В работе оцениваются матожидание вектора параметров модели $\hat{\mathbf{w}}$, а также матрица ковариации параметров $\mathbf{A}$ с помощью методов бутстрепа и вариационного вывода.

Для метрического анализа пространства параметров выбираются набор множеств индексов $\mathcal{I}_1 \sqcup \cdots \sqcup \mathcal{I}_k \subset \{1, \ldots, len(\mathbf{w})\}$, рассматриваются соответствующие им подвектора параметров $\mathbf{w}_{\mathcal{I}_1}, \ldots, \mathbf{w}_{\mathcal{I}_k}$ Считается, что каждый $\mathbf{w}_{\mathcal{I}_j}$ соответствует «смысловой единице» модели. В нейросетевых моделях это строки матрицы линейного преобразования пространства параметров W, которые обычно называют *нейронами*.

Для каждого $\mathbf{w}_{\mathcal{I}}$ оценивается матожидание $\hat{\mathbf{w}}_{\mathcal{I}}$ и ковариационная матрица $\mathbf{A}_{\mathcal{I}}$, с помощью которых и проводится метрический анализ пространства параметров.

3 Computational experiment

3.1 SSA

Скалярный временной ряд $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \varepsilon$ состоит из $n = 500$ значений зашумленного синуса, измеренного в точках интервала $[-\pi, \pi]$ с равномерным шагом. Использован шум из распределения $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, 0.2)$. Изображение данных представлено на рис. 3.

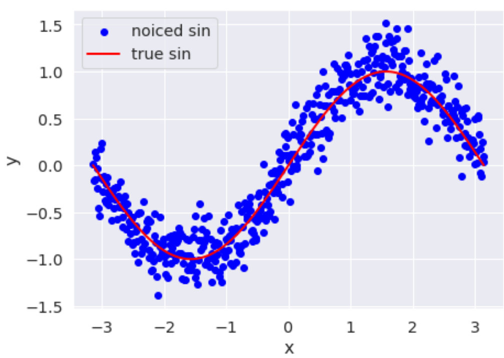
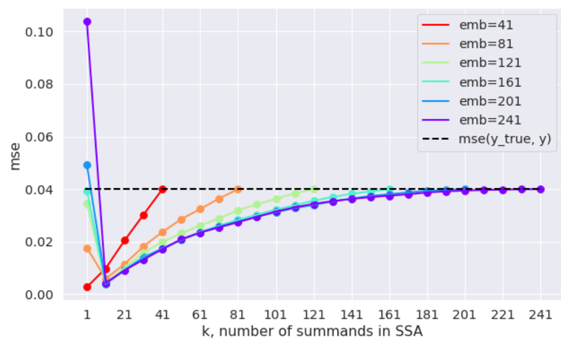


Рис. 3 Зашумленный синус.

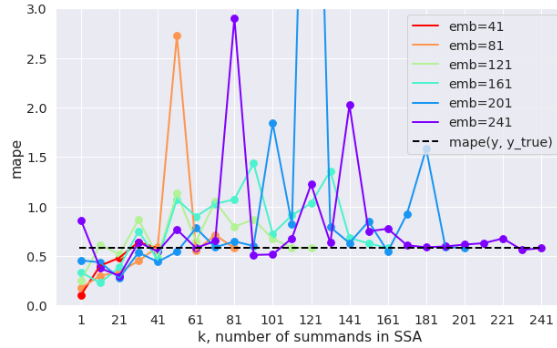
С помощью метода SSA построена зависимость точности восстановления временного ряда $\mathbf{x}$ из шумного ряда $\tilde{\mathbf{x}}$ в зависимости от ширины окна h и количества главных компонент k при восстановлении матрицы $\mathbf{X}$.

В качестве критерия качества использовались MSE и MAPE, замеренные между восстановленным рядом $\hat{\mathbf{x}}$ и истинным значением ряда $\mathbf{x}$. Результаты представлены на рис. **??** и рис. **??**.

Различная длина графиков обусловлена тем, что длина окна h не может быть больше чем количество слагаемых в SVD-восстановлении ряда. Видно, что истинное значение ряда с большой точностью восстанавливается при достатоно небольшом количестве слагаемых (< 20), что соответствует точке минимума всех графиков на левом рисунке. Чем больше компонет используется, тем больше становится ошибка и при количестве компонент равном длине окна MSE становится таким же, как и MSE между истинным значением ряда и его шумной версией (графики приближаются к горизонтальной пунктирной линии).



(a): MSE для различных значений значения h (emb_size) и k. Черной линией выделен MSE между чистым и зашумленным рядом.



($б$): MAPE для различных значений значения h (emb_size) и k. Черной линией выделен MAPE между чистым и зашумленным рядом.

Полученные результаты подтверждают практическую состоятельность SSA: алгоритм восстанавливает главный тренд при небольшом количестве сингулярных слагаемых $\mathbf{X}_i$.

4 *

Список литературы

Weikuan Jia, Meili Sun, Jian Lian, and Sujuan Hou. Feature dimensionality reduction: a review. *Complex & Intelligent Systems*, 8(3):2663–2693, 2022.

Cem Örnek and Elif Vural. Nonlinear supervised dimensionality reduction via smooth regular embeddings. *Pattern Recognition*, 87:55–66, 2019.

John P Cunningham and Byron M Yu. Dimensionality reduction for large-scale neural recordings. *Nature neuroscience*, 17(11):1500–1509, 2014.

RV Isachenko and VV Strijov. Quadratic programming feature selection for multicorrelated signal decoding with partial least squares. *Expert Systems with Applications*, 207:117967, 2022.

Babak Hassibi, David G Stork, and Gregory J Wolff. Optimal brain surgeon and general network pruning. In *IEEE international conference on neural networks*, pages 293–299. IEEE, 1993.

Xin Dong, Shangyu Chen, and Sinno Pan. Learning to prune deep neural networks via layer-wise optimal brain surgeon. *Advances in Neural Information Processing Systems*, 30, 2017.

Андрей Валериевич Грабовой, Олег Юрьевич Бахтеев, and Вадим Викторович Стрижов. Определение релевантности параметров нейросети. *Информатика и её применения*, 13 (2):62–70, 2019.

Андрей Валериевич Грабовой, Олег Юрьевич Бахтеев, and Вадим Викторович Стрижов. Введение отношения порядка на множестве параметров аппроксимирующих моделей. *Информатика и её применения*, 14(2):58–65, 2020.

Trevor Hastie, Robert Tibshirani, Jerome H Friedman, and Jerome H Friedman. *The elements of statistical learning: data mining, inference, and prediction*, volume 2. Springer, 2009.

Nina Golyandina, Vladimir Nekrutkin, and Anatoly A Zhigljavsky. *Analysis of time series structure: SSA and related techniques*. CRC press, 2001.

Michael M Bronstein, Joan Bruna, Taco Cohen, and Petar Veličković. Geometric deep learning: Grids, groups, graphs, geodesics, and gauges. *arXiv preprint arXiv:2104.13478*, pages 89–95, 2021.

Diederik P Kingma, Max Welling, et al. An introduction to variational autoencoders. *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 12(4):307–392, 2019.

Ricky TQ Chen, Yulia Rubanova, Jesse Bettencourt, and David K Duvenaud. Neural ordinary differential equations. *Advances in neural information processing systems*, 31, 2018.

Mohammad Malekzadeh, Richard G Clegg, Andrea Cavallaro, and Hamed Haddadi. Protecting sensory data against sensitive inferences. In *Proceedings of the 1st Workshop on Privacy by Design in Distributed Systems*, pages 1–6, 2018.