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 вариациопного вывода. Эксперименты проводятся на задачах восстановления синтетических временных рядов, квазипериодических показаний акселерометра, периодических видеоданных. Для восстановления применяются модели SSA (singular spectrum analysis), нелинейного РСА (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,
- з пространство параметров, выбор модели.
- 4 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 недостаткок 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:

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

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

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

44 В нейросети эти строки обычно называются *нейронами*. В SSA $\sigma = Id$, а матрица $\mathbf{W} = \mathbf{W}_k$ 45 это приближение истинной матрицы фазовых траекторий X (матрицы Ганкеля) суммой k46 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.,

55 2009] оцениваются их матожидания $\mathbf{e}_i = \mathsf{E}(\mathbf{w}_i)$ и ковариационные матрицы $\mathsf{D}(\mathbf{w}_i) = \mathbf{A}_i^{-1}$.

56 Мы работаем в гипотезе, что эти векторы \mathbf{w}_i распределены нормально, таким образом

57 пара $(\mathbf{e}_i, \mathbf{A}_i^{-1})$ полностью описывает вероятностное распределение вектора \mathbf{w}_i .

59 жаются положения этих векторов как смеси гауссианов. На
60 рис. 1 изображены плотности функции распределения трех
61 гауссовских векторов (вертикальная ось) в зависимости от
62 их положения на плоскости. В каждой точке плотность рав63 на сумме плотностей трех распределений, отнормированная

В качестве графического анализа пространства изобра-

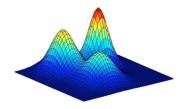


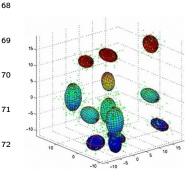
Рис. 1 Смесь гауссианов трех 2-х мерных векторов.

64 таким образом, чтобы площадь под графиком равнялась 1.

65 Точкам максимума куполов распределения соответствуют матожидания векторов, а их

66 форма определяется матрицей ковариации A (добавить стиль). Таким образом, чем ниже

67 и шире 'купол', тем больше дисперсия и наоборот.



58

73

76

Рис. 2 Доверительные области 3-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.

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

77 обобщения алгоритма QPFS, изучения структуры сообществ строк.

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

- 3адача восстановления временного ряда решается на синтетических данных зашумленного sin, данных показания акселерометра в датасете MotionSense3 [Malekzadeh et al.,
- вз 2018], периодичных видеоданных.

84 2 Problem statement

- Пусть имеется множество из m временных рядов $\mathcal{S} = \{\mathbf{s}_1, \dots, \mathbf{s}_m\}, \mathbf{s}_i = [\mathbf{s}_i^1, \dots, \mathbf{s}_i^T], \mathbf{s}_i^j \in \mathbb{R},$
- 86 где n длина сигналов. Каждый временной ряд последовательность измерений
- вт величины в течение времени.
- Вев Definition 1. Временное представление $\mathbf{x}_t = [\mathbf{s}_1^t, \dots, \mathbf{s}_m^t]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^m$ состоит из измерений
- в временных рядов в момент времени t.
- 90 Definition 2. Предыстория длины h для момента времени t множества временных рядов
- 91 \mathcal{S} это матрица $\mathbf{X}_{t,h} = [\mathbf{x}_{t-h+1}, \dots, \mathbf{x}_t]^\mathsf{T} \in \mathbb{R}^{h \times m}$.
- 92 **Definition 3.** Горизонт прогнозирования длины р для момента времени t множества
- 93 временных рядов \mathcal{S} это матрица $\mathbf{Y}_{t,p} = [\mathbf{x}_{t+1}, \dots, \mathbf{x}_{t+p}]^\mathsf{T}$.
- **Definition 4.** Прогностическая модель $\mathbf{f}^{\mathsf{AR}}: \mathbb{R}^{h \times m} \to \mathbb{R}^{p \times m}$ является авторегрессионной
- моделью, которая по предыстории $\mathbf{X}_{t,h}$ предсказывает горизонт планирования $\mathbf{Y}_{t,p}$.
- 96 Решается задача авторегрессионного декодирования. Она состоит в построении прогно-
- ${f f}^{AR}$, дающий ${f copuson} m$ прогнозирования множества временных рядов по
- *предыстории* того же множества рядов. В дальнейшем будем считать, что восстанавливаем
- 99 1 временной ряд, то есть что m = 1.
- обозначим множество всех одномерных временных рядов через S:

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

102 Тогда прогностическая модель это функция $f^{\mathsf{AR}}:\mathbb{S} \to \mathbb{R}$. Изначальный временной ряд

 $\mathbf{s} = [s_1, \dots, s_T]$ делится на две части $\mathbf{s} = [\mathbf{s}^H | \mathbf{s}^T], \mathbf{s}^H = [s_1, \dots, s_h], \mathbf{s}^T = [s_{h+1}, \dots, s_T].$ Задача

Машинное обучение и анализ данных, 2017. Том ??, № ??.

104 состоит в том, чтобы предсказать \mathbf{s}^T с максимальной точностью. Предсказание происходит 105 следующим образом:

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

Модель $f = f(\mathbf{w}, \mathbf{s}), \mathbf{w} \in \mathbb{W}, \mathbf{s} = [s_1, \dots, s_t] \in \mathbb{R}^t$ 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

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

111

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

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

Траекторная матрица является матрицей Ганкеля, так как каждая диагональ вида $i+j=const\ {\rm codeржит}\ {\rm oduhakobbe}\ {\rm элементы}.\ {\rm Beкторы}\ X_i\ {\rm являются}\ {\rm точками}\ {\rm фазовой}$ 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.

$_{121}$ 2.1 SSA

В модели SSA восстановление временного ряда получается за счет разложения матрицы

123 фазовой траектории в сумму одноранговых матриц.

Далее вычисляются собственные значения и соответствующие собственным подпро-

125 СТРАНСТВАМ ОРТОНОРМИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ ВЕКТОРОВ МАТРИЦЫ

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

127 Обозначим через

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

129 собственные значения S,

$$u_1, \dots u_h$$

ортонормированную систему собственных векторов, соответствующую собственным значе-

132 НИЯМ,

126

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

134 Тогда

135
$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 + \dots + \mathbf{X}_d, \mathbf{X}_i = \sqrt{\lambda_i} u_i v_i^T$$

- SVD-разложение **X**. Далее происходит группировка матриц **X** $_i$, их ганкелизация и

137 ВОССТАНАВЛИВАЕТСЯ МАТРИЦА СИГНАЛА

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

говать Где $\operatorname{hank}(X)$ — ганкелизация матрицы X, состоящая в том, что на каждой диагонали

вида i+j=const все элементы заменяются на их среднее арифметическое. Параметрами

141 модели SSA являются множества I_1, \ldots, I_m .

$\simeq 2.2$ Нейросеть

Модель двуслойной нейросети с ортогональными преобразованиями задается следую-

144 щим образом:

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \sigma(\mathbf{W}_1^\mathsf{T} \cdot \sigma(\mathbf{W}_2^\mathsf{T} \mathbf{x} + \mathbf{b}_1) + \mathbf{b}_2),$$

146 ГДЕ

$$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^h, \ \mathbf{W}_2 \in \mathbb{R}^{h \times d}, \mathbf{W}_1 \in \mathbb{R}^{d \times h} \ b_1 \in \mathbb{R}^h, \ b_2 \in \mathbb{R}^h; \mathbf{W}_1^\mathsf{T} \mathbf{W}_1 = \mathsf{I}, \mathbf{W}_2 \mathbf{W}_2^\mathsf{T} = \mathsf{I}.$$

148 Последние два условия гарантируют, что преобразования будет ортогональным. Здесь 149 нейросеть восстанавливает значения сигнала длиной в h моментов времени.

150 2.3 RNN

151

Модель RNN задается следующим образом:

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

$$\mathbf{s}_{t+1} = tanh(\mathbf{w}_o^\mathsf{T} \cdot \mathbf{h}_t),$$

где $\mathbf{h}_t \in \mathbb{R}^d$ — скрытое состояние RNN в момент времени $t, \mathbf{W} \in \mathbb{R}^{d \times d}, \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{d \times h}$.

зы $\mathbf{x}_t = [s_{t-h+1}, \dots, s_t] \in \mathbb{R}^h$ - временной ряд, подающийся на вход модели, $\mathbf{w}_o \in \mathbb{R}^d, s_{t+1} \in \mathbb{R}$ —

прогноз значения сигнала в момент времени t+1. Параметрами модели являются матрицы

158 ${f W}, {f V}, {f w}_0$ а также начальное скрытое состояние ${f h}_0$, которое мы зафиксируем ${f h}_0=0.$

О входном временном ряде выдвинута гипотеза о том, что точки на фазовой траектории

распределены по нормальному закону, то есть что $\mathbf{x}_t = [s_t, \dots, s_{t+h-1}] \sim \mathcal{N}(\hat{\mathbf{x}}_t, \mathbf{B})$, где

 $\hat{\mathbf{x}}_t$ — это матожидание точки фазовой траектории в момент времени t, а \mathbf{B} — матрица

162 ковариации. Мы также предполагаем, что [ссылаться на формулу, где впервые введена

163 W $\mathbf{w} \sim \mathcal{N}(\hat{\mathbf{w}}, \mathbf{A})$.

166

В работе оцениваются матожидание вектора параметров модели $\hat{\mathbf{w}}$, а также матрица

 $_{65}$ ковариации параметров ${f A}$ с помощью методов бутстрепа и вариационного вывода.

Для метрического анализа пространства параметров выбираются набор множеств ин-

дексов $\mathcal{I}_1 \sqcup \cdots \sqcup \mathcal{I}_k \subset \{1,\ldots,len(\mathbf{w})\}$, рассматриваются соответствующие им подвектора

параметров $\mathbf{w}_{\mathcal{I}_1},\dots,\mathbf{w}_{\mathcal{I}_k}$ Считается, что каждый $\mathbf{w}_{\mathcal{I}_j}$ соответствует «смысловой едини-

169 це» модели. В нейросетевых моделях это строки матрицы линейного преобразования

 \mathbf{w} пространства параметров \mathbf{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

174 3.1 SSA

184

185

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.

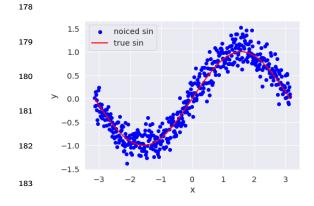
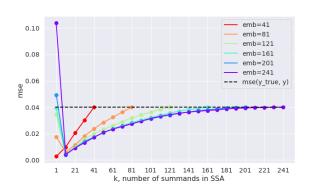


Рис. 3 Зашумленный синус.

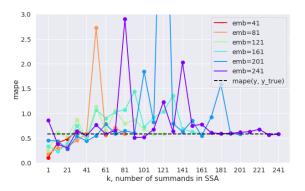
С помощью метода SSA построена зависимость точности восстановления временного ряда \mathbf{x} из шумного ряда $\tilde{\mathbf{x}}$ в зависимости от ширины окна h и количества главных компонент k при восстановлении матрицы \mathbf{X} .

В качестве критерия качества использовались MSE и MAPE, замеренные между восстановленным рядом $\hat{\mathbf{x}}$ и истинным значением ряда \mathbf{x} . Ре-

зультаты представлены на рис. ?? и рис. ??.



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



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

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).

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

196 3.2 Двуслойная нейросеть с ортогональными преобразованиями

Скалярный временной ряд $\tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \varepsilon$ состоит из n = 500 значений зашумленного синуса, измеренного в точках интервала $[-4\pi, 4\pi]$ с равномерным шагом. Использован шум из распределения $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, 0.2)$. Изображение данных представлено на рис. 4.

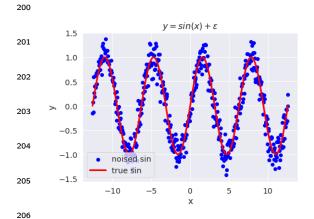


Рис. 4 Зашумленный синус.

пространстве рис 5.

207

208

209

С помощью нейросети решалась заадча восстановления временного ряда. Скрытая размерность нейросети d=3, размерность траекторного пространства h=20.

На случайных подвыборках обучающей выборки были обучены N=100 нейросетей на 25 эпохах. Оценены матожидания и матрицы ковариаций столбцов параметра $\mathbf{W}_1 \in \mathbf{R}^{3\times 20}$. Полученные матрицы визуализированы в 3-х мерном

Все параметры-нейроны на рис. ? имеют форму вытянутых эллипсов, расположенных на удалении друг от друга. Часть эллипсов вытянута в одну и ту же сторону (уменьшения оси OY). В целом все эти нейроны кажутся довольно независимыми и не имеющими выраженной структуры сообществ.

В следующем эксперимента с нейросетью бра-217 лась архитектура 10-3-20, которая означает, что 218 на вход подаются $h_1=10$ -мерные векторы, размер-219 ность скрытого пространства d=3, а восстановить 220 нужно $h_1=20$ моментов времени.

221 На случайных подвыборках обучающей выборки

222 были обучены N=100 нейросетей на 70 эпохах. Оценены матожидания и матрицы 223 ковариаций столбцов параметра $\mathbf{W}_1 \in \mathbf{R}^{3 \times 10}$. Полученные матрицы визуализированы в 3-х 224 мерном пространстве рис 6.

3десь, в отличие от предыдущего эксперимента наблюдается разделение на 3 сообщества, соответствующие оранжевому, красному и фиолетовому эллипсоиду, которые имеют самую большую дисперсию среди нейронов (так как они большего объема).

Это частично подтверждает гипотезу о существовании структуры сообществ у нейронов.

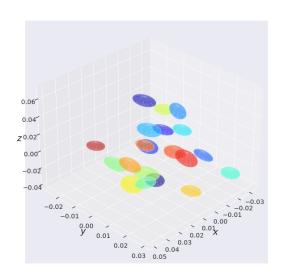


Рис. 5 Доверительные области 3-х мерных векторов двуслойной нейросети арихитектуры 20-3-20.

229 4 Решение задачи

230

239

240

249

250

231 шается задача байесовской дистилляции модели учителя в байесовскую версию модели ученика.

232 В качестве модели учителя используется модель HTNet [Peterson et al., 2021], которая основывается на EEGNet [Lawhern et al., 2018]. EEGNet являет- 236 ся сверточной неросетью с 5 последовательными слоями: temporal convolution (различная дискретизация сигнала для получения фильтров часто-

 $m\omega$), depthwise convolution (сверточные фильтры

для получения частото-специфичных признаков),

(заимствовано из диссертации Грабового). Ре-

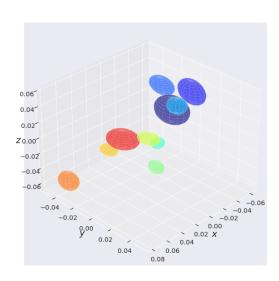


Рис. 6 Доверительные области 3-х мерных векторов двуслойной нейросети арихитектуры 10-3-20.

separable convolution (depthwise convolution для суммаризации информации внитри каждой частоты и затем pointwise convolution для смешение признаков).

Решается задача предсказания движения рук по электрокортикограмме головного
 мозга.

245 Задана выборка

246
$$\mathcal{D} = \{(\mathbf{s}_i, \mathbf{y}_i)\}_{i=1}^N, \mathbf{s}_i \in \mathbb{R}^n, \mathbf{y}_i \in \mathbb{R}^m,$$

247 где ${f s}_i-i$ -ый временной ряд электрокортикограммы, ${f y}_i$ - соответствующий временной ряд 248 движения руки.

Задана модель учителя в виде суперпозиций линейных и нелинейных преобразований:

$$\mathbf{f} = \sigma \circ \mathbf{U}_T \circ \sigma \circ \mathbf{U}_{T-1} \circ \cdots \circ \mathbf{U}_2 \circ \sigma \circ \mathbf{U}_1$$

где T — число слоев модели учителя (от 5 до 8 у применяемых далее моделей), σ — функция активации, \mathbf{U}_t — матрица линейного преобразования. Матрицы \mathbf{U}_t , параметры модели

 $_{253}$ учителя, соединяются в вектор параметров ${f u}$ модели учителя ${f f}$:

$$\mathbf{u} = vec([\mathbf{U}_T, \mathbf{U}_{T-1}, \dots, \mathbf{U}_1]).$$

Мы работаем в предположении, что параметры учителя распределены нормально. Для
 модели учителя оценивается апостериорное распределение вектора параметров

$$p(\mathbf{u}) = p(\mathcal{N}(\overline{\mathbf{u}}_{ps}, \mathbf{A}_{ps}^{-1})).$$

258 В качестве модели ученика используется байесовская нейронная сеть [вставить ссылку на 259 статью], задаваемая аналогично модели учителя:

$$\mathbf{g} = \sigma \circ \mathbf{W}_{L} \circ \sigma \circ \mathbf{W}_{L-1} \circ \cdots \circ \mathbf{W}_{2} \circ \sigma \circ \mathbf{W}_{1}.$$

261 Мы считаем, что

263

$$\mathbf{w} \sim \mathbf{N}(\overline{\mathbf{w}}_t, \mathbf{B}^{-1}).$$

Алгоритм римановской дистилляции представлен ниже.

Алгоритм 1 Алгоритм Римановской дистилляции

1. Зафиксировать структуру модели ученика ${\bf g}$ и учителя ${\bf g}$, то есть параметры T,L и размеры матриц ${\bf U}_t, {\bf W}_t$.

- 2. Обучить модель учителя **g**.
- 3. Оценить апостериорное распределение параметров учителя $p_{ps}(\mathbf{u})$, то есть параметры $\overline{\mathbf{u}}$, \mathbf{A}^{-1} .
- 4. Назначить параметрам ученика априорное распределение $p(\mathbf{w}) \sim p_{ps}(\mathbf{u})$. Где \sim обозначает преобразование распределения, описанное в работе [Grabovoy and Strijov, 2021].
- 5. Обучить байесовскую сеть ученика на ответах учителя, получив апостериорное распределение парметров ученика $p(\mathbf{w}|\mathcal{D}) = p(\mathbf{N}(\overline{\mathbf{w}}_t, \mathbf{B}^{-1})).$
- 6. Провести метричекий анализ пространства параметров ученика и снизить его размерность.

264 Обучение байесовской модели ученика производится при прмощи вариационного вывода 265 на основе совместного правдоподобия данных:

$$\mathcal{L}(\mathcal{D}) = \log p(\mathcal{D}) = \log \int_{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^k} p(\mathcal{D}|\mathbf{w}) \cdot p(\mathbf{w}) d\mathbf{w},$$

267 где $p(\mathbf{w})$ - априорное распределение параметров модели ученика, которое получается преобразованием из апостериорного распределения параметров учителя. С учетом нашего предположения, что оно является нормальным, обучение ученика сводится к решению задачи:

$$\widehat{\mathbf{w}} = \operatorname*{arg\,min}_{\mu, \mathbf{\Sigma}, \mathbf{w}} \mathsf{D}_{\mathsf{KL}}(p(\mathbf{w}|\mathcal{D})||p(\mathbf{w})) - \log p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w}).$$

где второе слагаемое - логарифм правдоподобия выборки, а первое - KL-дивергенция между априорным и апостериорным распределением параметров ученика.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ 15

274 **5** *

- 275 Список литературы
- Weikuan Jia, Meili Sun, Jian Lian, and Sujuan Hou. Feature dimensionality reduction: a review.
- 277 Complex & Intelligent Systems, 8(3):2663–2693, 2022.
- ²⁷⁸ 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.
- 282 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.
- ²⁸⁷ 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.
- 289 Андрей Валериевич Грабовой, Олег Юрьевич Бахтеев, and Вадим Викторович Стрижов.
- Определение релевантности параметров нейросети. Информатика и её применения, 13
- (2):62-70, 2019.
- 292 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.
- ²⁹⁵ 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,
- зол 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.
- Steven M Peterson, Zoe Steine-Hanson, Nathan Davis, Rajesh PN Rao, and Bingni W Brunton.
- Generalized neural decoders for transfer learning across participants and recording modalities.
- Journal of Neural Engineering, 18(2):026014, 2021.
- Vernon J Lawhern, Amelia J Solon, Nicholas R Waytowich, Stephen M Gordon, Chou P
- Hung, and Brent J Lance. Eegnet: a compact convolutional neural network for eeg-based
- brain-computer interfaces. Journal of neural engineering, 15(5):056013, 2018.
- Andrey Valerievich Grabovoy and Vadim V Strijov. Bayesian distillation of deep learning models.
- Automation and Remote Control, 82:1846–1856, 2021.