1 Тропическая геометрия нейронных сетей

В разделе 5 нейронные сети определяются с помощью тропической алгебры, что позволяет нам изучать их с помощью тропической алгебраической геометрии. Мы покажем, что граница принятий решений нейронной сети — это подмножество тропической гиперповерхности, соответствующего тропического полинома(Раздел 6.1). Мы увидим, что в некотором смысле, зонотопы образуют геомтрические строительные блоки для нейронных сетей (Раздел 6.2). Затем мы докажем, что геометрия функции, представленной нейронной сетью, становится значиттельно более сложной с увеличением ее количества слоёв.

1.1 Границы решений нейронной сети

Мы будем использовать тропическую геометрию и идеи из Раздела 5 для изучения границ решений нейронных сетей, фокусируясь на случае классификации двух категорий для ясности. Как объяснено в Разделе 4, нейронная сеть $\nu : \mathbf{R}^d \to \mathbf{R}^p$ вместе с выбором функции оценки $s : \mathbf{R}^p \to \mathbf{R}$ дают нам активатор. Если выходное значение $s(\nu(x))$ превышает некоторый порог принятия решений c, то нейронная сеть предсказывает, что x относится к одной категории (например, x — изображение кота), а в противном случае x относится к другой категории (например, x — изображение собаки). Таким образом входной пространство разделено на два непересекающихся подмножества *границей принятия решений* $B := \{x \in \mathbf{R}^d : \nu(x) = s^{-1}(c)\}$. Связанные области со значением выше порога и связные области со значением ниже порога будем называть *положительными* и *отрицательными областями* соответственно.

Предоставим оценки на количество положительных и отрицательных областей и покажем, что существует тропический многочлен, чья тропическая гиперповерхность содержит границу решений.

Утверждение 1 *(Тропическая геометрия границы решений). Пусть $\nu : \mathbf{R}^d \to \mathbf{R}$ — L-слойная нейронная сеть, удовлетворяющая предположению $(a) - (c)$ с $t^{(L)} = -\infty$. Пусть функция счета $s : \mathbf{R} \to \mathbf{R}$ является инъективной с порогом принятия решений c в его диапазоне. Если $\nu = f \oslash g$, где f и g — тропические многочлены, тогда*

1. *Его граница решений $B = \{x \in \mathbf{R}^d : \nu(x) = s^{-1}(c)\}$ делит $\mathbf{R}^d$ на не более чем $N(f)$ связных положительных областей и не более, чем $N(g)$ связных отрицательных областей;*

2. *Его раница решений содержится в тропической гиперповерхности тропического многочлена $s^{-1} \odot g(x) \oplus f(x) = \max\{f(x), g(x) +$*

$s^{-1}(c)\}$, то есть

$$B \subset T(s^{-1}(c) \odot g \oplus f)$$

Функция $s^{-1}(c) \odot g \oplus f$ не обязательно линейна на каждой положительной или отрицательной области и поэтому ее тропическая гиперповерхность $T(s^{-1}(c) \odot g \oplus f)$ может дальше делить положительные или отрицательные области, полученные из B на несколько линейных областей. В общем случае $\subset$ нельзя заменить на $=$.

1.2 Зонотопы, как геометрические строительные блоки нейронной сети

Из раздела 3, мы знаем, что число областей тропической гиперповерхности $T(f)$ делит пространство на равное число вершин в двойственном разбиении многоугольника Ньютона, связанного с тропическим многочленом f. Это позволяет нам ограничить количество линейных областей нейронной сети, ограничивая число вершин в двойственном разбиении многоугольника Ньютона.

Мы начнём изучение того, как геометрия меняется от одного слоя к следующему в нейронной сети, более точнее:

Вопрос 1 *Как тропические гиперповерхности тропических многочленов в $(l+1)$-ом слое нейронной сети связаны с ими в l-ом слое? содержимое...*

Рекуррентное соотношение (2) описывает, как тропические многочлены, встречающиеся в $(l+1)$-ом слое получаются из многочленов в l-ом слое, а именно, через три операции: тропическая сумма, тропическую степень и тропическое умножение. Напомним, что тропическая гиперповерхность тропического многочлена — двойственно разбиение многогранника Ньютона тропического многочлена, который задается проекцией верхних граней на многогранники, определяемые формулой (1). Отсюда вопрос сводится к тому, как эти три операции преобразуют многогранники, а это рассматривается в утверждениях 3.1 и 3.2. Мы следуем обозначениям из Утверждения 5.1 для следующего результата.

Лемма 1 *Пусть $f_i^{(l)}, g_i^{(l)}, h_i^{(l)}$ тропические многочлены, созданные i-ым узлом в l-ом слое нейронной сети, то есть они определяются как (2). Тогда $P(f_i^{(l)}, P(g_i^{(l)}, P(h_i^{(l)}$, являющиеся подмножествами $\mathbf{R}^{d+1}$, задаются следующим образом:*

1. *$P(g_i^{(1)}$ и $P(h_i^{(1)}$ являются точками.*

2. $P(f_i^{(1)}$ — *отрезок.*

3. $P(g_i^{(1)\ и\ P(h_i^{(1)}}$ — *зонотопы.*

4. *Для* $l \geq 1$,
$$P(h_i^{(l)}) = Conv[P(g_i^{(l)} \odot t_i^{(l)}) \cup P(h_i^{(l)})]$$
Если $t_i^{(l)} \in \mathbf{R}$, *и* $P(f_i^{(l)}) = P(h_i^{(l)})$, *если* $t_i^{(l)} = -\infty$

5. *Для* $l \geq 1, P(g_i^{(l+1)})$ *и* $P(h_i^{(l+1)})$ *взвешены суммы Минковского,*
$$P(g_i^{(l+1)}) = \sum_{j=1}^{n_l} a_{ij}^{-} P(f_i^{(l)}) + \sum_{j=1}^{n_l} a_{ij}^{+} P(g_i^{(l)}),$$
$$P(h_i^{(l+1)}) = \sum_{j=1}^{n_l} a_{ij}^{+} P(f_i^{(l)}) + \sum_{j=1}^{n_l} a_{ij}^{-} P(g_i^{(l)})$$
$$+\{b_i e\},$$
Где a_{ij}, b_i *записаны в матрице весов* $A^(l+1) \in \mathbf{Z}^{n_{l+1} \times n_l}$ *и вектор смещения* $b^(l+1) \in \mathbf{R}^{n_l+1}$ *и* $e := (0, \ldots, 0, 1) \in \mathbf{R}^{d+1}$.

Завершение леммы 6.2 состоит в том, что зонотопы являются строительными блоками в тропической геометрии нейронных сетей. Зонотопы широко изучены в выпуклой геометрии и, среди прочего, они тесно связаны с расположением гиперплоскостей. Лемма 6.2 связывает нейронные сети с этим обширным объёмом работы, но полный смысл этого еще предстоит изучить. В разделе C.2, кроме того, мы покажем, как можно построить эти многогранники для двуслойных нейронных сетей.

1.3 Геометрическая сложность глубоких нейронных сетей

Мы обращаемся к инструментам из раздела 3 для изучения сложности нейронной сети, показывая, что глубокая сеть более выразительна, чем неглубокая. Наша мера сложности является геометрической: мы будему следовать (Montufar et al., 2014; Raghu et al., 2017) и использовать количество линейных областей кусочно-линейной функции $\nu : \mathbf{R}^d \to \mathbf{R}^p$ для измерения сложности ν.

Теорема 1 *Пусть $\nu : \mathbf{R}^d \to \mathbf{R}$ является L-слоем вещественной нейронной сетью с прямой связью, удовлетворяющей (a)-(c). Пусть $t^{(L)} = -\infty$ и $n_l \geq d$ для всех $l = 1, \ldots, L-1$. Тогда $\nu = \nu^{(L)}$ имеет максимум*

$$\prod_{l=1}^{L-1} \sum_{i=0}^{d} \binom{n_l}{i}$$

линейных областей. В частности, если $d \leq n_1, \ldots, n_{L-1} \leq n$, то число линейных областей ν ограничено $O(n^{d(L-1)})$.

Доказательство. Если $L = 2$, то это следует непосредственно из Леммы 6.2 и Следствия 3.4. Случай, когда $L \geq 3$ находится в разделе 7, в дополнении. ■

Как отмечалось в (Raghu et al., 2017), эта верхняя граница близко соответствует нижней границе $\Omega((\frac{n}{d}^{(l-1)d})n^d)$ в (Montufar et al., 2014, Corollary 5), когда $n_1 = \cdots = n_{L-1} = n \geq d$. отсюда мы предполагаем, что число линейных областей нейронной сети растёт полиномиально с шириной n и экспоненциально с количеством слоёв L.

1.4 Заключение

Мы утверждаем, что прямые нейронные сети с выпрямленными узлами не что иное, как тропические рациональные карты. Чтобы понять их, нам зачастую нужно понимать соответствующую тропическую геометрию.

В этой статье мы сделали первый шаг, чтобы предоставить подтверждение концепции: вопросы, касающиеся границ решений, линейных областей, как глубина влияет на выразительность и т.д. можно перевести на вопросы, касающиеся тропических гиперповерхностей, разбиений многоугольника Ньютона, многогранников, построенных из зонотопов и др.

Как новая ветвь алгебраической геометрии, новшество тропической геометрии происходит из алгебры и геометрии и их взаимодействует друг с другом. Она связана множеством других областей математики. Среди прочих вещей, существует тропический аналог линейной алгебры и тропический аналог выпуклой геометрии. Мы затронули лишь небольшую часть этого богатого предмета. Мы надеемся, что дальнейшее исследование под тропическим углом поможет разгадать другие загадки глубоких нейронных сетей.

1.5 Дополнительный материал: Тропическая геометрия нейронных сетей

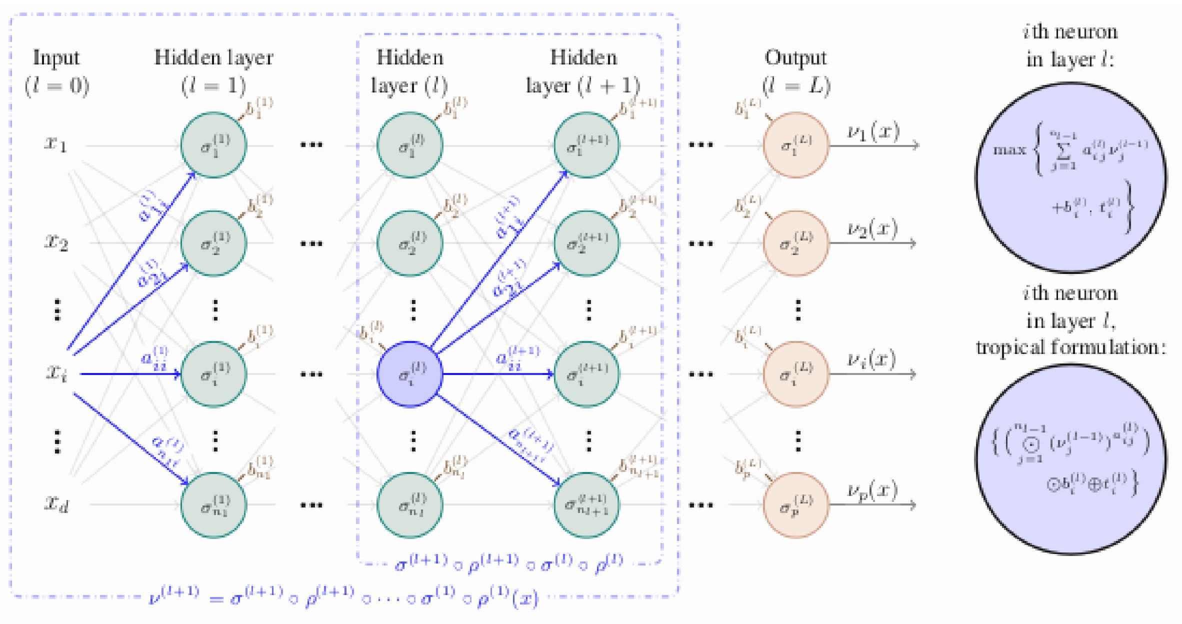


Рис. 1: Общая форма ReLU прямой нейронной сети $\nu : \mathbf{R}^d \to \mathbf{R}^P$ с L слоями

1.6 Тропическая степень

В разделе 2 мы пишем $x^a = x^{\odot a}$; кроме этого небольшого злоупотребления обозначениями, $\oplus$ и $\odot$ соответствуют тропической сумме и умножению, $+$ и - соответствуют классической сумме и умножению во всех других контекстах. Тропическая степень, очевидно, имеет следующие свойства:

- Для $x, y \in \mathbf{R}$ и $a \in \mathbf{R}$, $a \geq 0$

$$(x \oplus)^a = x^a \oplus y^a$$

$$(x \odot y)^\alpha = x^\alpha \odot y^\alpha$$

  Если a отрицательное число, то мы теряем первой свойство. В общем $(x \oplus y)^a \neq x^a \oplus y^a$ для $a < 0$.

- Для $x, y \in \mathbf{R}$

$$x^0 = 0$$

- Для $x \in \mathbf{R}$ и $a, b \in \mathbf{N}$

$$(x^a)^b = x^{a \cdot b}$$

- Для $x \in \mathbf{R}$ и $a, b \in \mathbf{Z}$
$$x^a \odot x^b = x^{a+b}$$

- Для $x \in \mathbf{R}$ и $a, b \in \mathbf{Z}$
$$x^a \oplus x^b = x^a \odot (x^{a-b} \oplus 0) = x^a \odot (0 \oplus x^{a-b})$$

1.7 Примеры

1.7.1 Примеры тропических кривых и двойственное разбиение многоугольника Ньютона

Пусть $f \in Pol(2,1) = \mathbf{T}[x_1, x_2]$, то есть двумерный тропический полином. В соответствии нашим рассуждениям в разделе 3 следует, что тропическая гиперповерхность $T(f)$ — планарный граф двойственный двойственному разбиению $\delta(f)$ в следующем смысле:

1. Каждой двумерной грани в $\delta(f)$ соответствует вершина в $T(f)$.

2. Каждому одномерному ребру грани в $\delta(f)$ соответствует ребро в $T(f)$. В частности, ребро многогранника Ньютона $\Delta(f)$ соответствует неограниченному ребру в $T(f)$, когда другие ребра соответствуют ограниченным ребрам.

   Рисунок 2 показывает как можно найти двойственное разбиение тропического полинома $f(x_1, x_2) = 1 \odot x_1^2 \oplus 1 \odot x_2^2 \oplus 2 \odot x_1 x_2 \oplus 2 \odot x_1 \oplus 2 \odot x_2 \oplus 2$. Во-первых, найдем выпуклую оболочку
$$P(f) = Conv\{(2,0,1), (0,2,1), (1,1,2), (1,0,2), (0,1,2), (0,0,2)\}$$
   Тогда, проецируя верхнюю оболочку $P(f)$ на $\mathbf{R}^2$, мы получим $\delta(f)$, двойственное разбиение многоугольника Ньютона.

1.7.2 Многогранники двухслойной нейронной сети

Продемонстрируем наши рассуждения в Разделе 6.2 на двухслойном примере. Пусть $\nu : \mathbf{R}^2 \to \mathbf{R}$ будет с $n_0 = 2$ входными узлами, $n_1 = 5$ в первом слое и $n_2 = 1$ узлов в выходе:

$$y = \nu^{(1)}(x) = \max\left\{ \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -3 \\ 1 & 2 \\ -4 & 1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 2 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}, 0 \right\}$$

$$y = \nu^{(2)}(y) = \max\{y_1 + 2y_2 + y_3 - y_4 - 3y_5, 0\}$$

Сначала мы выражаем $\nu^{(1)}$ и $\nu^{(2)}$, как тропическое рациональное отображение.

$$\nu^{(1)} = F^{(1)} \oslash G^{(1)}, \nu^{(2)} \oslash g^{(2)},$$

Где

$$y := F^{(1)}(x) = H^{(1)}(x) \oplus G^{(1)}(x)$$

$$z := G^{(1)}(x) = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2^3 \\ 0 \\ x_1^4 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$H^{(1)}(x) = \begin{bmatrix} 1 \odot x_2 \\ (-1) \odot x_1 \\ 2 \odot x_1 x_2^2 \\ x_2 \\ (-2) \odot x_1^3 x_2^2 \end{bmatrix}$$

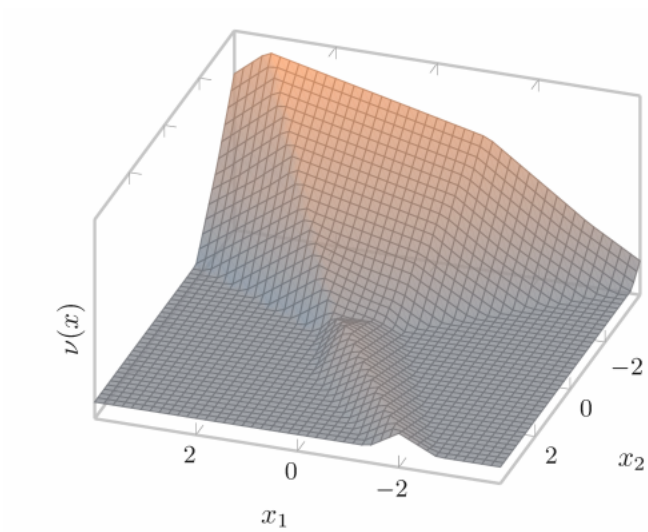
и

$$f^{(2)}(x) = g^{(2)}(x) \oplus h^{(2)}(x)$$

$$g^{(2)}(x) = y_4 \odot y_5^3 \odot z_1 \odot z_2^2 \odot z_3 = (x_2 \oplus x_1^4) \odot ((-2) \odot x_1^3 x_2^2 \oplus 0)^3 \odot x_1 \odot (x_2^3)^2$$

$$h^{(2)}(x) = y_1 \odot y_2^2 \odot y_3 \odot z_4 \odot z_5^3 = (1 \odot x_2 \oplus x_1) \odot ((-1) \odot x_1 \oplus x_2^3)^2 \odot (2 \odot x_1 x_2^2 \oplus 0) \odot x_1^4.$$

Запишем $F^{(1)} = (f_1^{(1)}, \ldots, f_5^{(1)})$ и аналогично для $G^{(1)}$ и $H^{(1)}$. Мономы



встречающиеся в $g_j^{(1)}(x)$ и $h_j^{1)}(x)$ являются всеми формами $cx_1^{\alpha_1}x_2^{\alpha_2}$. Следовательно $P(g_j^{(1)})$ и $P(h_j^{(1)})$ — точки в $\mathbf{R}^3$

Так как $F^{(1)} = G^{(1)} \oplus H^{(1)}, P(f_j^{(1)})$ — выпуклая оболочка двух точек, и является отрезком в $\mathbf{R}^3$. Многоугольники Ньютона связаны с $f_j^{(1)}$, равные их двойственным разбиениям, в этом случае, полученные проецированием этих отрезков на плоскость, натянутую на α_1, α_2, что показано на рисунке ниже.

В всех рисунках ниже, двойственные разбиения были проведены вдоль направления c(вниз) и отделены от многогранников для наглядности.

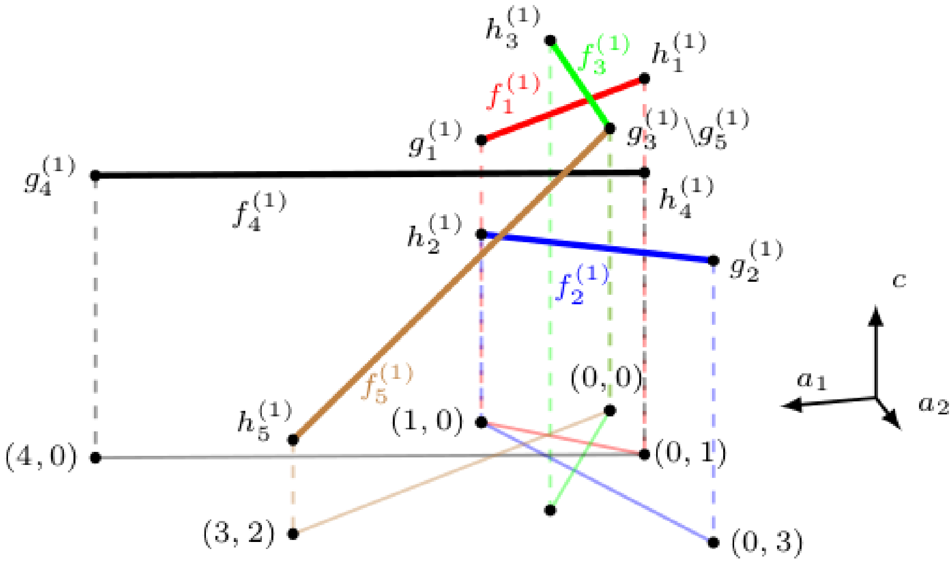


Рис. 2: $P(F^{(1)})$ и двойственное разбиение $F^{(1)}$

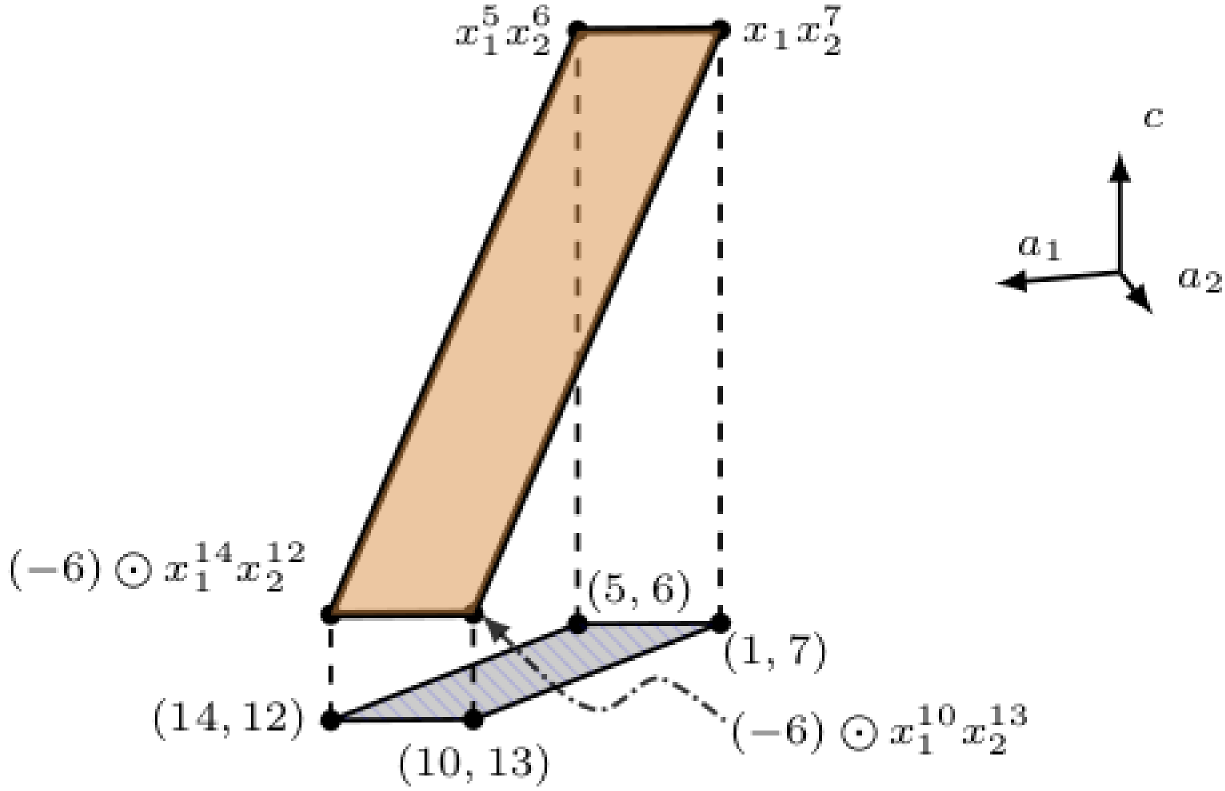


Рис. 3: $P(g^{(2)})$ и двойственное разбиение $g^{(2)}$

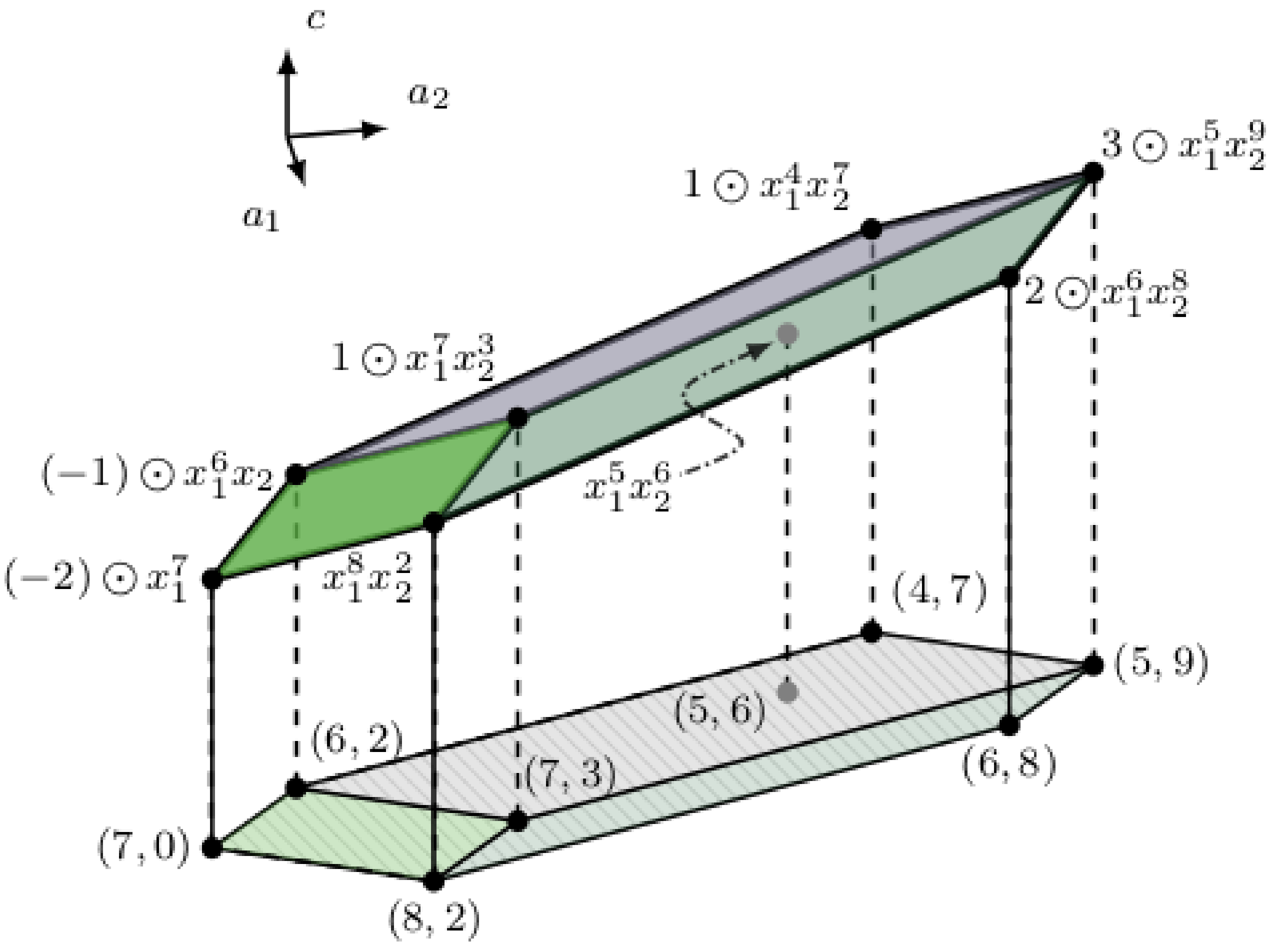


Рис. 4: Многогранник, связанный с $h^{(2)}$ и его двойственное разбиение

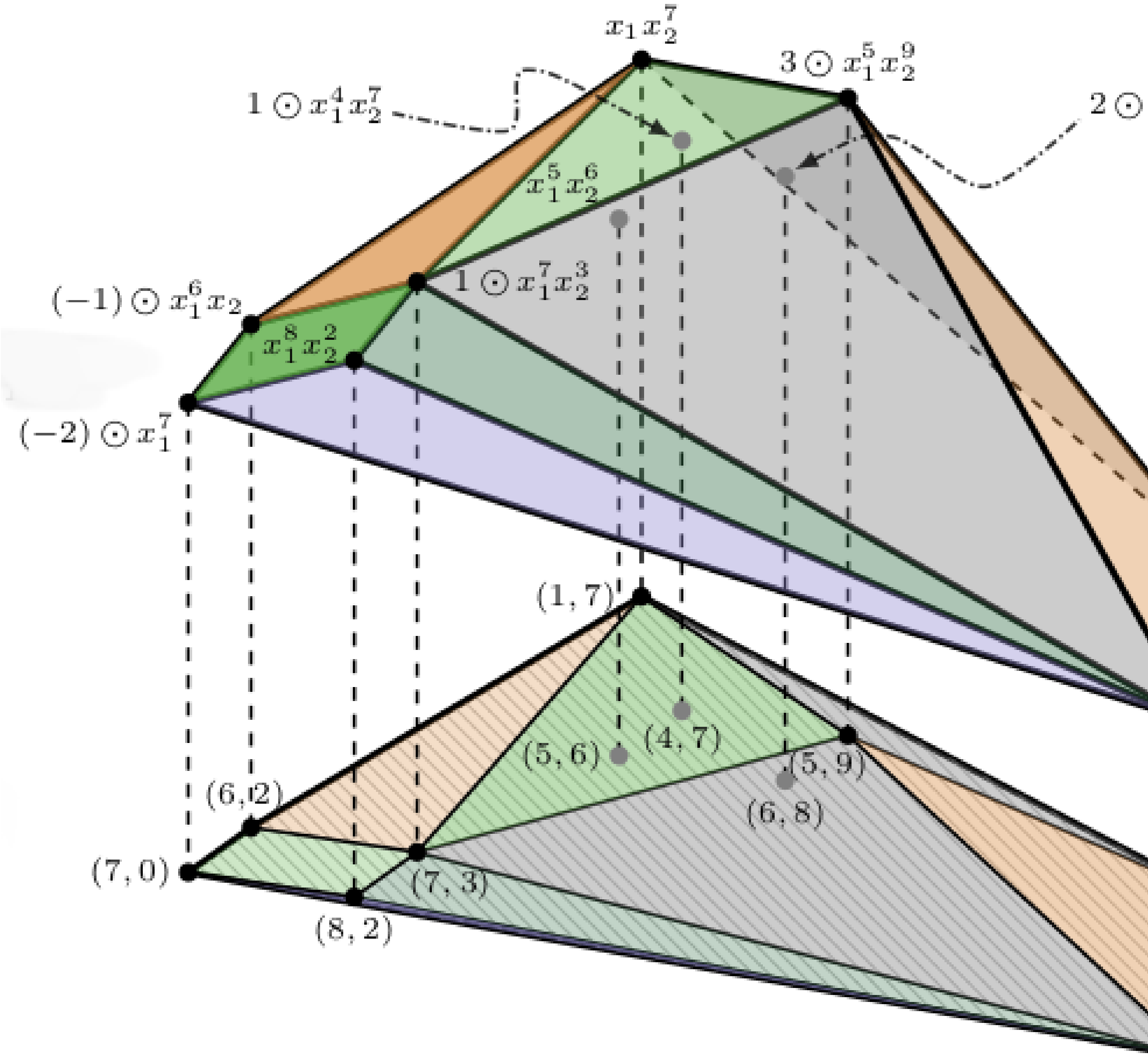


Рис. 5: $P(f^{(2)})$ и двойственное разбиение $f^{(2)}$

Отрезки $P(f_j^{(1)}), j = 1, \ldots, 5$ и точки $P(g_j^{(1)}) j = 1, \ldots, 5$,служат в качестве строительных блоков для $P(h^{(2)})$ и $P(g^{(2)})$, которые простроенны, как взвешенные суммы Минковского:

$$P(h^{(2)}) = P(f_4^{(1)}) + 3P(f_5^{(1)}) + P(g_1^{(1)}) + 2P(g_2^{(1)}) + P(g_3^{(1)})$$

$$P(g^{(2)}) = P(f_1^{(1)}) + 2P(f_2^{(1)}) + P(f_3^{(1)}) + P(g_4^{(1)}) + 3P(g_5^{(1)})$$