Тропическая геометрия в глубоких нейронных сетях

Дмитрий Зайков, Максим Олифер

17.11.2019

Аннотация

Впервые мы установили связь между нейронными сетями прямого распротранения с ReLU активациями и тропической геометрией — мы показываем, что семейство таких нейронных сетей эквивалентна семейству тропических рациональных отображений. Среди прочего, мы вывели, что ReLU нейросеть прямого распротранения с одним скрытым слоем может быть характеризована зонотопами, которые могут послужить блоками для строительства более глубоких сетей; мы связываем определение границ таких нейронных сетей с тропическими гиперповерхностями, главным объектом изучения в тропической геометрии; и мы доказываем, что линейные области таких нейронных сетей соответствуют вершинам политопов, связанных с тропическими рациональными функциями. Вывод из нашей тропической формулировки такой, что более глубокая нейронная сеть экспоненциально более выразительна, чем менее глубокая.

1 Введение

Глубокие нейронные сети недавно получили много внимания за их огромный успех в ряде приложений из многих областей искуственного интеллекта, компьютерного зрения, распознавания речи и генерации естественного языка. (LeCun et al., 2015; Hinton et al., 2012; Krizhevsky et al., 2012; Bahdanau et al., 2014; Kalchbrenner & Blunsom, 2013). Тем не менее, также известно, что наше теоретическое понимание их эффективности остается неполным.

Было несколько попыток анализа глубоких нейронных сетей с разных перспектив. Особенно ранние работы показали, что глубокие архитектуры могут использовать параметры более эффективно и требуют экспоненциально меньше параметров, чтобы выражать определенные семейства функций, чем менее неглубокие архитектуры (Delalleau & Bengio, 2011; Bengio & Delaleau, 2011; Montufar et al., 2014; Eldan & Shamir, 2016; Poole et al., 2016; Arora et al., 2018). Недавняя работа (Zhang et al., 2016) показала, что несколько успешных нейронных сетей обладают большой репрезентативностью и могут легко разбивать случайные данные. Однако они также хорошо обобщают данные, которые они не видели, во время тренировочного этапа, поэтому можно предположить, что такие сети могут иметь некоторую встроенную регуляризацию. Традиционные меры сложности, такие как размерность Вапника-Червоненкиса и Rademacher complexity, не могут объяснять данный феномен. Пони-

мание данной встроенной регуляризации, порождающей обобщающую мощь глубоких нейронных сетей остается проблемой.

Цель нашей работы - установить связи между нейронными сетями и тропической геометрией в надежде, что она прольет свет на работу глубоких нейронных сетей. Тропическая геометрия это новая область алгебраической геометрии, пережившей взрывной рост за последнюю декаду, но остающейся относительно беззвестной за пределами чистой математики. Мы сконцентрируемся на нейронных сетях прямого распротранения с ReLU и покажем, что они являются аналогаим рациональных функций, т.е. отношением двух многомерных многочленов f, g для переменных $x_1, ..., x_d$,

$$\frac{f(x_1, ..., x_d)}{g(x_1, ..., x_d)},$$

в тропической геометрии. Для стандартных и тригонометрических полиномов известно, что рациональная аппроксимация — это приближение функции отношением двух полиномов вместо одного полинома — значительно улучшает качество аппроксимации без повышения степени. Это дает аналогию: нейронная сеть с ReLU это тропическое отношение двух тропических многочленов, т.е. тропическая рациональная функция. Точнее, если мы рассмотрим нейронную сеть как функцию $v : R^d \Rightarrow R^p, x = (x_1, ..., x_d) \implies ((v_1(x)), ..., v_p(x))$, где каждая v это тропическое пространство, т.е. каждая v это тропическая рациональная функция. Фактически, мы покажем, что

семейство функций, представленных нейронной сетью прямого распротранения с ReLU и целочисленными весами это в точности семейство тропических рациональных пространств.

Отсюда немедленно следует, что на данном семействе существует полуполе. Что более важно, это устанавливает мост между нейронными сетями и тропической геометрией, что позволяит нам рассмотреть нейронные сети как хорошо изученные тропические объекты. Это знание помогает нам связать ближе гриницы между линейными областями в нейронных сетях с тропическими гиперповерхностями и тем самым способствовать в определентю границ нейронной сети для проблемы классификации как тропических гиперповерхностей. Более того, количество линейных областей, что является мерой сложности нейронной сети (Montufar et al., 2014; Raghu et al., 2017; Arora et al., 2018), может быть ограничено количеством вершин политопа, связанного с тропическим представлением нейронной сети. Наконец, нейронная сеть с одним скрытым слоем может быть полностью характеризована зонотопом, который служит строительным блоком для более глубоких сетей.

В разделах 2 и 3 мы введем необходимую нам базу тропической алгебры и тропической геометрии. Мы точно определим предположения в разделе 4 и установим связь между тропической геометрией и многослойной нейронной сетью в разделе 5. Мы проанализируем нейронные сети с помощью тропических методов в разделе 6, доказывая, что более глубокая нейросеть экспоненциально лучше выражает, чем менее глубокая — хотя наша цель не столько показать результат анализа, сколько продемонстрировать, как тропическая геометрия может помочь получить полезные знания. Все доказательства отложены в раздел D дополнения.

2 Тропическая алгебра

Грубо говоря, тропическая алгебраическая геометрия - аналогия классической алгебраической геометрии над $\mathbb{C}$, полем комплексных чисел, но где $\mathbb{C}$ заменяется на полуполе, называемое тропическим полукольцом, которое будет определено далее. Мы предоставим краткий обзор тропической алгебры и введем некоторые связанные условные обозначения. См. (Itenberg et al., 2009; Maclagan & Sturmfels, 2015) для более глубокого изучения.

Самый фундаментальный компонент тропической геометрии - *тропическое полукольцо* $\mathbb{T} := (\mathbb{R} \cup \{-\infty\}, \oplus, \odot)$. Два оператора $\bigoplus$ и $\bigodot$, называемые *тропическое сложение* и *тропическое умножение* соответственно, определяются следующим образом:

Определение 1 *Для x, $y \in \mathbb{R}$ их тропическая сумма это $x \bigoplus y := max\{x, y\}$; их тропическое произведение это $x \odot y := x + y$; тропическое частное $x \oslash y := x - y$.*

Для любого x $\in \mathbb{R}$ имеем что $-\infty \oplus x = 0 \odot x = x$ и $-\infty \odot x = -\infty$. Следовательно $-\infty$ это тропическая аддитивная идентичность (нуль) и 0 это тропическая мультипликативная идентичность (единица). Более того, эти операции удовлетворяют обычным правилам арифметики: ассоциативность, коммутативность и дистрибутивность. Множетсво $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ это, следовательно, полукольцо под операциями $\oplus$ и $\odot$. Пока это не кольцо (не хватает аддитивной инверсии), однако можно создать много алгебраических объектов (например, матрицы, многочлены, тензоры и т.д.) и понятий (например, ранг, детерминант, степень и т.д.) над тропическим полукольцом - данный объект, вкратце, образовывает предмет тропической геометрии.

Пусть $\mathbb{N} = \{n \in \mathbb{Z} : n \geq 0\}$. Для целого $a \in \mathbb{N}$, возводение $x \in \mathbb{R}$ в a-ю степень тоже самое, что умножение x на себя a раз. Если стандартное

умножение заменить на тропическое умножение, получится *тропическая степень*

$$x^{\odot a} := x \odot ... \odot = a \cdot x,$$

где последняя $\cdot$ обозначает обычное умножение вещественных чисел; её можно расширить до $\mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, определив для любого $a \in \mathbb{N}$

$$-\infty^{\odot a} := \begin{cases} -\infty & \text{if } a > 0, \\ 0 & \text{if } a = 0. \end{cases}$$

Тропическое полукольцо, не являясь полем, обладает одним качеством поля: Каждый $X \in \mathbb{R}$ имеет тропическую мультипликативную инверсию, получаемую из стандартной аддитивной инверсии, т.е. $x^{\odot(-1)} := -x$. Хотя это и не отражено в названии, $\mathbb{T}$ это по факту *полуполе*.

Поэтому можно также возвести $x \in \mathbb{R}$ в отрицательную степень $a \in \mathbb{Z}$, возведя его тропическую мультипликативную инверсию $-x$ в положительную степень $-a$, т.е. $x^{\odot a} = (-x)^{\odot(-a)}$. Как и в случае обычной рациональной арифметики, тропическая аддитивная инверсия $-\infty$ не имеет мультипликативной инверсии и $-\infty^{\odot a}$ неопределено для $a < 0$. Для упрощения записи, отныне мы будем писать x^a вместо $x^{\odot a}$ для тропической степени, когда нет возможности запутаться. Остальные свойства тропической степени могут быть получены из определения; см. секцию B для дополнительной информации.

Мы дошли до точки, где мы можем определить тропические многочлены и тропические рациональные функции. Далее x и x_i будут обозначать переменные (т.е. неизвестные).

Определение 2 *Тропический моном от d переменных $x_1, ..., x_d$ это выражение вида*

$$c \cdot {x_1}^{a_1} \odot {x_2}^{a_2} \odot ... \odot {x_d}^{a_d}$$

где $c \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$ и $a_1, ..., a_d \in \mathbb{N}$. Как удобное сокращение, мы также будем записывать тропические мономы как cx^a, где $a = (a_1, ..., a_d) \in \mathbb{N}^d$ и $x = (x_1, ..., x_d)$. Заметим, что $x^a = 0 \cdot x^a$, т.к. 0 это тропическая мультипликативная идентичность.

Определение 3 *Используя обозначения выше, тропический многочлен $f(x) = f(x_1, ..., x_d)$ это конечная тропическая сумма тропических мономов*

$$f(x) = c_1 x^{a_1} \oplus ... \oplus c_r x^{a_r}$$

где $a_i = (a_i 1, ..., a_i d) \in \mathbb{N}^d$ *и* $c_i \in \mathbb{R} \cup \{-\infty\}$, $i = 1, ..., r$. *Мы предположим, что моном в данной сумме появляется максимум один раз в сумме, т.е.* $a_i \neq a_j$ *для любых* $i \neq j$.

Определение 4 *Используя обозначения выше, тропическая рациональная фунция это стандартная разность или, эквивалентно, тропическое частное двух тропических полиномов* $f(x)$ *и* $g(x)$*:*

$$f(x) - g(x) = f(x) \oslash g(x)$$

Мы обозначим тропическую рациональную функцию как $f \oslash g$*, где* f *и* g *- тропические полиномиальные функции.*

Нетрудно проверить, что множество тропических полиномов $\mathbb{T}[x_1, ..., x_d]$ образует полукольцо под расширением с помощью $\oplus$ и $\odot$ обычных до тропическхи многочленов, а также множество тропических рациональных функций $\mathbb{T}(x_1, ..., x_d)$ образует полуполе. Мы рассматриваем тропический многочлен $f = f \oslash 0$ как частный случай тропической рациональной функции и, следовательно, $T[x_1, ..., x_d] \subseteq T(x_1, ..., x_d)$. Отныне любое следствие, установленное для тропичекой функции, будет также переноситься и на тропический многочлен.

Тропический многочлен f(x) с d переменными определяет функцию $f : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$, являющейся *выпуклой функцией* в обычном значении, т.к. взятие максимума и суммирование выплуклых функций сохраняет выпуклость (Boyd & Vandenberghe, 2004). Поэтому тропическая рациональная функция $f \oslash g : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ это *DC-фунция* (от англ. difference-convex function) (Hartman, 1959; Tao & Hoai An, 2005).

Нам понадобятся понятия тропических многочленов и тропических рациональных функций с векторными значениями.

Определение 5 $F : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^p, x = (x_1, ..., x_d) \mapsto (f_1(x), ..., f_p(x))$*, называется тропическим полиномиальным отображением, если каждый* $f_i : R^d \to R$ *- тропический многочлен,* $i = 1, ..., 0$*, и тропическим рациональным отображением, если* $f_1, ..., f_p$ *это тропические рациональные функции. Мы обозначим множество тропических полиномиальных отображений как* $Pol(d, p)$ *и множество тропических рациональных отображений как* $Rat(p, d)$*. Так,* $Pol(d, 1) = \mathbb{T}[x_1, ..., x_d]$ *и Rat(d,1)* $= \mathbb{T}(x_1, ..., x_d)$.

3 Тропические гиперповерхности

Существуют тропические аналогии многих понятий классической алгебраической геометрии (Itenberg et al., 2009; Maclagan & Sturmfels, 2015),

среди которых есть *тропические гиперповерхности*, тропические аналогии алгебраических кривых в классической алгебраической геометрии. Тропические гиперповерхности являются главным объектом интереса в тропической геометрии, и они окажутся очень полезными в нашем применении к нейронным сетям. Наглядно, тропические гиперповерхности тропического многочлена f это множество точек x, где f нелинейна в x.

Определение 6 *Тропическая гиперповерхность тропического многочлена* $f(x) = c_1 x^{a_1} \oplus ... \oplus c_r x^{a_r}$ *это*

$$\mathcal{T}(f) := \{x \in R^d : c_i x^{a_i} = c_j x^{a_j} = f(x)$$

для некоторых $a_i \neq a_j\}$

т.е. множество точек, где значение f *в* x *достигается в двух или более мономах в* f.

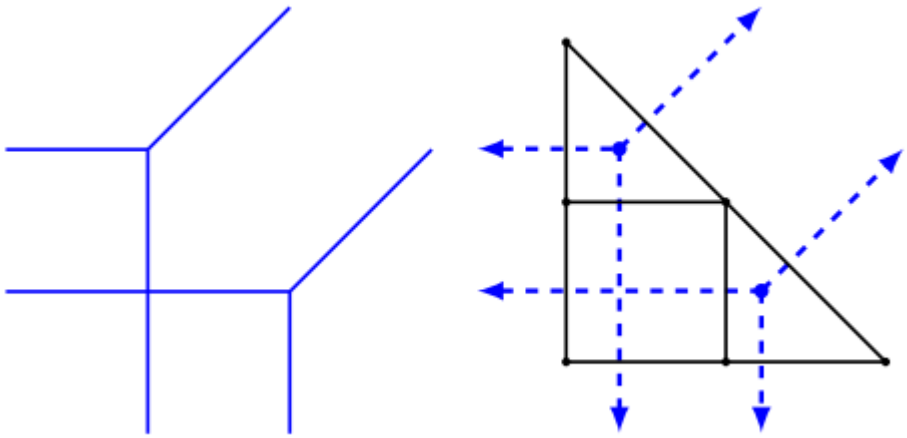


Рис. 1: $1 \odot x_1^2 \oplus 1 \odot x_2^2 \oplus 2 \odot x_1 x_2 \oplus 2 \odot x_1 \oplus 2 \odot x_2 \oplus 2$. Слева: Тропическая кривая. Справа: двойственное разбиение многогранника Ньютона и тропическая кривая.

Тропические гиперповерхности делят пространство f на выпуклые ячейки, на каждой из которых f линейна. Эти ячейки - выпуклые многогранники, т.е., определенные линейными неравенствами с целочисленными коэффициентами: $x \in R^d : Ax \leq b$ для $A \in Z^{m \times d}$ и $b \in R^m$. Например, ячейка, где тропический моном $c_j x^{a_j}$ достигает максимума это

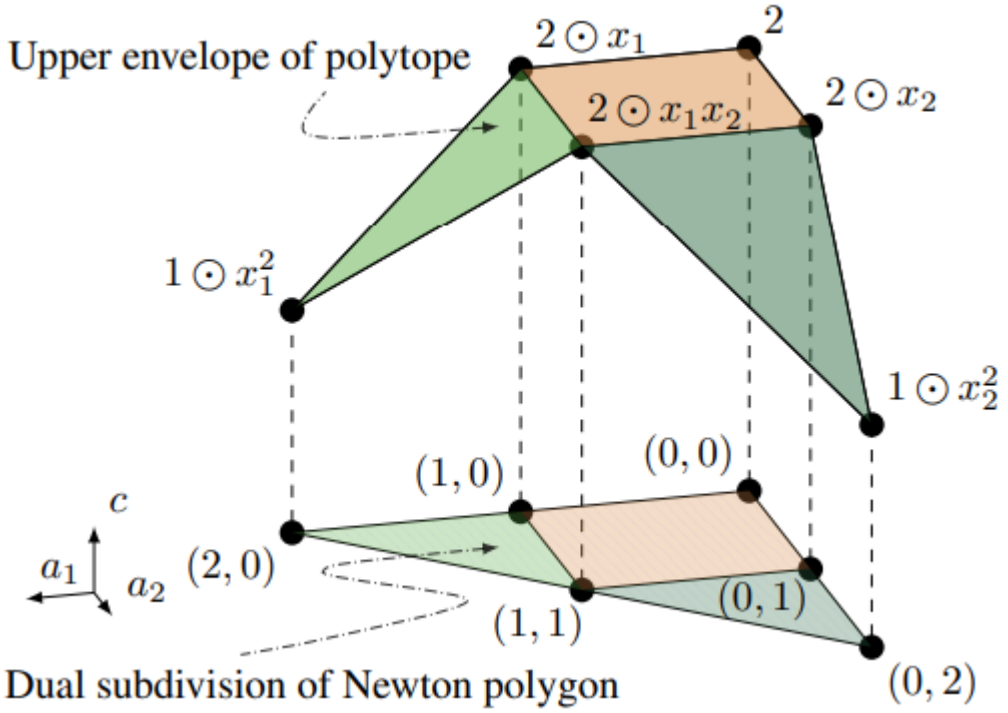


Рис. 2: $1 \odot x_1^2 \oplus 1 \odot x_2^2 \oplus 2 \odot x_1 x_2 \oplus 2 \odot x_1 \oplus 2 \odot x_2 \oplus 2$. Двоичное разбиение может быть получено проектированием краев верхних граней политопа.

$\{x \in R^d : c_j + a_j^T x \geq c_i + a_i^T x$ для всех $i \neq j\}$. Тропические гиперповерхности многочленов от двух переменных (т.е. в R^2) называются *тропическими кривыми*.

Также, как и обычные многочлены, для каждого тропического многочлена есть соответствующий *многогранник Ньютона*.

Определение 7 *Многогранником Ньютона тропического многочлена* $f(x) = c_1 x^{a_1} \oplus ... \oplus c_r x^{a_r}$ *называют выпуклую оболочку* $a_1, ..., a_r \in \mathbb{N}^d$, *рассматриваемые как точки в* $\mathbb{R}^d$,

$$\Delta(f) := Conv\{a_i \in \mathbb{R}^d : c_i \neq -\infty, i = 1, ..., r\}.$$

Тропический многочлен f определяет двойственное разбиение $\Delta(f)$, построенное следующим образом. Во-первых, необходимо поднять каждое a_i из $\mathbb{R}^d$ в $\mathbb{R}^{d+1}$, добавляя c_i как последнюю координату. обозначим выпуклую оболочку поднятых $a_1, ..., a_r$ как:

$$\mathcal{P}(f) := Conv\{(a_i, c_i) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R} : i = 1, ..., r\}.$$

Далее пусть $UF(\mathcal{P}(f))$ обозначает коллекцию верхних граней $\mathcal{P}(f)$, а $\pi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^d$ - проекция, опускающая последнюю координату. Тогда двойственное разбиение, определяемое f, это:

$$\delta(f) := \{\pi(p) \subset \mathbb{R}^d : p \in UF(\mathcal{P}(f))\}.$$

$\delta(f)$ формирует многогранный комплекс с помощью $\Delta(f)$. По (Maclagan & Sturmfels, 2015, Proposition 3.1.6) тропическая гиперповерхность $\mathcal{T}(f)$ это $(d-1)$-скелет многогранного комплекса, двойственного к $\delta(f)$. Это означает, что каждая вершина $\delta(f)$ соответствует одной "ячейке"в $\mathbb{R}^d$, где функция f линейна. Таким образом, количество вершин в $\mathcal{P}(f)$ является верхней границей для количества линейных областей f.

Рисунок 1 показывает многогранник Ньютона и двойственное разбиение тропического многочлена $f(x_1, x_2) = 1 \odot x_1^2 \oplus 1 \odot x_2^2 \oplus 2 \odot x_1 x_2 \oplus 2 \odot x_1 \oplus 2 \odot x_2 \oplus 2$.. Рисунок 2 показывает, как мы можем найти двойственное разбиение для данного тропического многочлена, следую вышеупомянутым инструкциям; дано детально и пошагово в разделе C.1.

Тропические многочлены и тропические рациональные функции это, очевидно, кусочно-линейные функции. По существе, тропическое рациональное отображение это кусочно линейное отображение, с которым связано понятие *линейной области.*

Определение 8 *Линейной областью $F \in Rat(d, m)$ называют максимальное связаное подмножество области, на котором F линейна. Количество линейных областей F обозначается как $\mathcal{N}(F)$*

Заметим, что тропическое *полиномиальное* отображение $F \in Pol(d, m)$ имеет выпуклые линейные регионы, но тропическое *рациональное* отображение $F \in Rat(d, n)$ в общем случае имеет невыпуклые линейные области. В Главе 6.3 мы используем $\mathcal{N}(F)$ как меру сложности для $F \in Rat(d, n)$, задаваемой нейронной сетью.

3.1 Преобразования тропических многочленов

Наш анализ нейронных сетей потребует выяснения, как политоп $\mathcal{P}(f)$ преобразуется под тропической степенью, суммой или произведением. Первое довольно просто.

Утверждение 1 *Пусть f это тропический многочлен и $a \in \mathbb{N}$. Тогда*

$$\mathcal{P}(f^a) = a\mathcal{P}(f).$$

$a\mathcal{P}(f) = \{ax : x \in \mathcal{P}(f)\} \subseteq \mathbb{R}^{d+1}$ это растянутая версия $\mathcal{P}(f)$ с такой же формой, но отличным объемом.

Чтобы объяснить эффект от тропической суммы и произведенния, нам понадобится несколько из выпуклой георметрии. *Суммой Минковского* двух множеств P_1 и P_2 в R^d называют множество

$$P_1 + P_2 := \{x_1 + x_2 \in R^d : x_1 \in P_1, x_2 \in P_2\};$$

и для $\lambda_1, \lambda_2 \geq 0$ их *взвешенная сумма Минковского* это

$$\lambda_1 P_1 + \lambda_2 P_2 := \{\lambda_1 x_1 + \lambda_2 x_2 \in R^d : x_1 \in P_1, x_2 \in P_2\}$$

Взвешенная сумма Минковского , очевидно, коммутативна и диструбутивна и обобщается для более чем двух множеств. В частности, сумма Минковского линейных сегментов называется *зонотопом.*

Пусть $\mathcal{V}$ обозначает множетсво вершин политопа P. Очевидно, сумма Минковского двух политопов задается выпуклой оболочкой суммы Минковского множеств их вершин, т.е. $P_1 + P_2 = Conv(\mathcal{V}(P_1) + \mathcal{V}(P_2))$. Из данного замечания немедленно следует следующее.

Утверждение 2 *Пусть $f, g \in Pol(d, 1) = \mathbb{T}[x_1, ..., x_d]$ это тропические многочлены. Тогда*

$$\mathcal{P}(f \odot g) = \mathcal{P}(f \oplus g) = Conv(\mathcal{V}(P(f)) \cup \mathcal{V}(P(g))). \tag{1}$$

Далее мы перескажем часть (Gritzmann & Sturmfels, 1993, Theorem 2.1.10) и выведем следствие для ограничения количества вершин на верхних краях зонотопа.

Теорема 1 *(Gritzmann–Sturmfels). Пусть $P_1, ..., P_k$ - политопы в R^d и пусть m обозначает суммарное количество непараллельных рёбер $P_1, ..., P_k$. Тогда количество вершин $P_1 + ... + P_k$ не превышает*

$$2 \sum_{k=0}^{d-1} \binom{m-1}{j}.$$

Верхняя граница достигается, если все P_i-е это зонотопы и образующие их отрезки находятся в общих позициях.

Следствие 1 *Пусть $P \subseteq \mathbb{R}^{d+1}$ это зонотоп, образованный m отрезками $P_1, ..., P_m$. Пусть $\pi : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^d$ - это проекция. Предположим, P удовлетворяет:*

1. *образующие отрезки стоят в базовых позициях;*

2. *множество спроектированных вершин* $\{\pi(v) : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}^d\}$ *в базовых позициях.*

Тогда у P *есть*

$$\sum_{j=0}^{d} \binom{m}{j}$$

вершин на его верхних гранях. Если или 1, или 2 нарушается, тогда это превращается в верхнюю границу.

Как мы отмечали, линейные области тропического многочлена f соответствуют вершинам на $UF(\mathcal{P}(f))$, а следствие будет полезно для ограничения количества линейных областей.

4 Нейронные сети

Хотя мы и ожидаем, что читатель знаком с нейронными сетями прямого распротранения, тем не менее, в этой короткой главе мы определим их, в первую очередь чтобы зафиксировать обозначения и указать на допущения, которые мы сохраним в течение этой статьи. Мы ограничим наше внимание на полносвязных нейронных сетях прямого распротранения.

Рассматривая отвлеченно, нейронная сеть с L-слоями прямого распротранения это отображение $v : R^d \to R^p$, заданное композицией функций

$$v = \sigma^{(L)} \circ p^{(L)} \circ \sigma^{(L-1)} \circ p^{L-1} \circ ... \circ \sigma^{(1)} \circ p^{(1)}$$

Преактивационные функции $p^{(1)}, ..., p^{(L)}$ это аффинные преобразования, которое будет определено, а *активационные* функции $\sigma^{(1)}, ..., \sigma^{(L)}$ выбираются и фиксируются далее.

Обозначим *ширину*, т.е. количество узлов l-го слоя как n_l, l=1,...,L-1. Установим $n_0 := d$ и $n_L = p$, соответственно размеры входа и выхода сети. Выход l-го слоя будет обозначен как

$$v^{(l)} := \sigma^{(l)} \circ p^{(l)} \circ \sigma^{(l-1)} \circ p^{(l-1)} \circ ... \circ \sigma(1) \circ p^{(1)},$$

т.е. это отображение $v^{(t)} : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^{n_l}$. Для удобства положим $v^{(0)}(x) := x$.

Аффинная функция $p^{(l)} : \mathbb{R}^{n_{l-1})} \to \mathbb{R}^l$ задается матрицей *весов* $A^{(l)} \in Z^{n_l \times n_{l-1}}$ и вектором *смещения* $b^{(l)} \in R^{n_l}$:

$$p^{(l)}(v^{(l-1)}) := A^{(l)} v^{(l-1)} + b^{(l)}$$

Координаты (i, j) матрицы $A^{(l)}$ будут обозначены как $a_{ij}^{(l)}$ и i-я координата $b^{(l)}$ как $b_i^{(l)}$. Вместе они формируют *параметры* слоя l.

Для векторного входа $x \in \mathbb{R}^{n_l}, \sigma^{(l)}(x)$ должна пониматься в покоординатном смысле; так, $\sigma : \mathbb{R}^{n_l} \to \mathbb{R}^{n_l}$. Мы принимаем, что последний выход нейронной сети $v(x)$ будет передан в *оценочную функцию (score function)* $s : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}^m$, которая зависит от применения. Когда сеть используется в качестве классификатора из m классов, s может быть, например, softmax или сигмоидальной функцией. Оценочная функция довольно часто рассматривается как последний слой нейронноей сети, но это делается просто из удобства, и мы не будем так делать. Мы примем следующие небольшие положения об архитектуре нейронной сети прямого распространения и объясним далее, почему они на самом деле небольшие:

1. веса матриц $A^{(1)}, ..., A^{(L)}$ целочисленые;
2. вектора смещений $b^{(1)}, ..., b^{(L)}$ рациональные;
3. функции активаций $\sigma^{(1)}, ..., \sigma^{(L)}$ принимают форму

$$\sigma^{(l)}(x) := max\{x, t^{(l)}\},$$

где $t^{(l)} \in (R \cup \{-\infty\})^{n_l}$ называется пороговым вектором.

Отныне все нейронные сети в нашей дальнейшей дискуссии будут соответствовать пункати (a)-(c).

(b) довольно общий, но потери всеобщности нет и в (a), т.е. в ограничении весов $A^{(1)}, ..., A^{(l)}$ от вещественных матриц до целых, так как:

- вещественные веса могут быть приближены довольно близко рациональными весами;
- затем можно «очистить знаменатели» в этих рациональных весах путем умножения их на наименьшее общее кратное их знаменателей для получения целых весов;
- держим в голове, что масштабирование всех весов и смещений одной и той же положительной константой не влияет на работу нейронной сети.

Активационная функция в (c) включает как ReLU ($t^{(l)} = 0$), так и идентичное отображение ($t^{(l)} = -\infty$) как частные случаи. В случаях не с ReLU наш тропический каркас будет поддерживать кусочно-линейные активации, такие как leaky ReLU, абсолютное значение, и, с небольшим

усилием, может быть расширен до max pooling, сетей maxout и т.п. Но он не поддерживает такие активации, как, например, гиперболический тангенс и сигмоиду.

В данной работе мы рассматриваем нейросети с ReLU как на простейшую и наиболее каноничную модель нейронной сети, из которой могут быть выведены другие варианты, эффективные в конкретных задачах. Учитывая, что мы ищем общие теоретические идеи, а не специфичную практическую эффективность, имеет смысл ограничить себя до этого простейшего случая. Более того, нейросети с ReLU уже воплощают некоторые наиболее важные элементы (и загадки), распространенные в большом ряде нейронных сетей (например, универсальное приближение, экспоненциальная экспрессивность); они работают хорошо на практике и часто выбираются для сетей прямого распространения. Мы не одни ограничиваем дискуссию до нейросетей с ReLU (Montufar et al., 2014; Aroraet al., 2018).

5 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 геометрические строительные блоки для нейронных сетей (Раздел 6.2). Затем мы докажем, что геометрия функции, представленной нейронной сетью, становится значительно более сложной с увеличением ее количества слоёв.

5.1 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 $\nu : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^p$ вместе с выбором функции оценки $s : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}$ 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*

$B := \{x \in \mathbb{R}^d : \nu(x) = s^{-1}(c)\}$. 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 3 *(Тропическая геометрия границы решений). Пусть* $\nu : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ *— L-слойная нейронная сеть, удовлетворяющая предположению* $(a) - (c)$ *с* $t^{(L)} = -\infty$. *Пусть функция счета* $s : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ *является иньективной с порогом принятия решений* c *в его диапазоне. Если* $\nu = f \oslash g$, *где* f *и* g *— тропические многочлены, тогда*

1. *Его граница решений* $B = \{x \in \mathbb{R}^d : \nu(x) = s^{-1}(c)\}$ *делит* $\mathbb{R}^d$ *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.* B *общем случае* $\subset$ *нельзя заменить на* $=$.

5.2 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 многогранника Ньютона, связанного с тропическим многочленом f. Это позволяет нам ограничить количество линейных областей нейронной сети, ограничивая число вершин в двойственном разбиении многогранника 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?*

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: тропическую сумму, тропическую степень и тропическое умножение. Напомним, что тропическая гиперповерхность тропического многочлена — двойственное 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 $\mathbb{R}^{d+1}$, 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 $t_i^{(l)} \in \mathbb{R}$, 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 $A^(l+1) \in \mathbb{Z}^{n_{l+1} \times n_l}$ и вектор смещения $b^(l+1) \in \mathbb{R}^{n_l+1}$ и $e := (0, \ldots, 0, 1) \in \mathbb{R}^{d+1}$.

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.

5.3 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 $\nu : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^p$ для измерения сложности ν.

Теорема 2 *Пусть $\nu : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ 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.

5.4 Заключение

Мы утверждаем, что прямые нейронные сети с выпрямленными узлами не что иное, как тропические рациональные отображения. 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 многогранника 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.

5.5 Дополнительный материал: Тропическая геометрия нейронных сетей

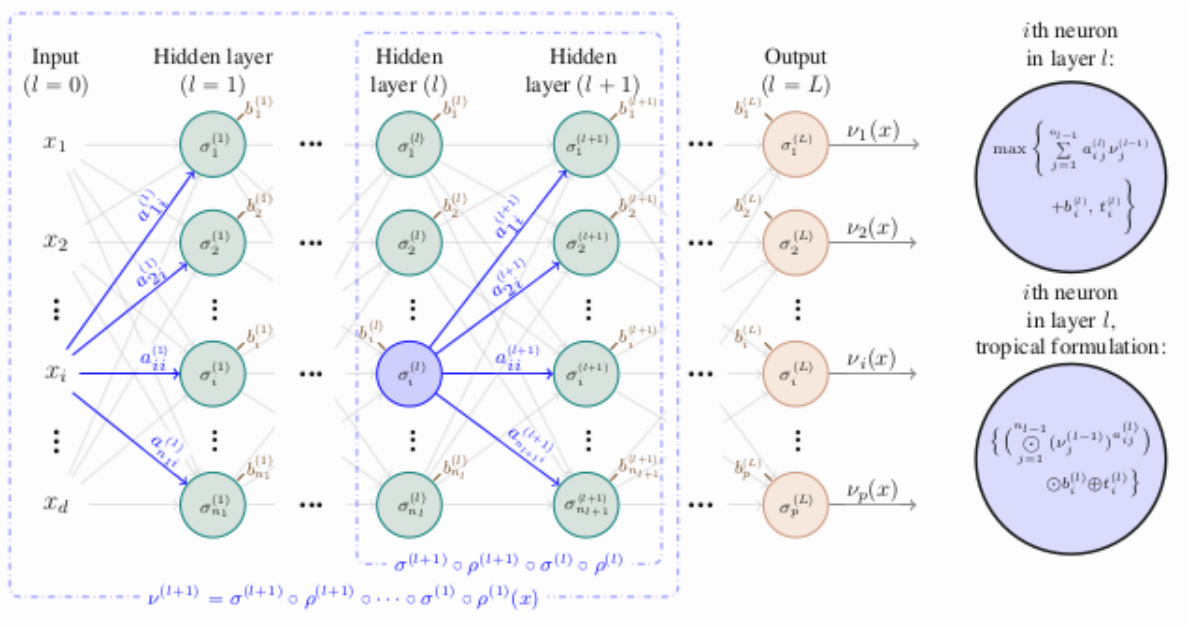


Рис. 3: Общая форма ReLU прямой нейронной сети $\nu : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^P$ с L слоями

5.6 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 $x, y \in \mathbb{R}$ и $a \in \mathbb{R}$, $a \geq 0$

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

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

  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 $x, y \in \mathbb{R}$

$$x^0 = 0$$

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

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

- Для $x \in \mathbb{R}$ и $a, b \in \mathbb{Z}$

$$x^a \odot x^b = x^{a+b}$$

- Для $x \in \mathbb{R}$ и $a, b \in \mathbb{Z}$

$$x^a \oplus x^b = x^a \odot (x^{a-b} \oplus 0) = x^a \odot (0 \oplus x^{a-b})$$

5.7 Примеры

5.7.1 Примеры тропических кривых и двойственное разбиение многогранника Ньютона

Пусть $f \in Pol(2,1) = \mathbb{T}[x_1, x_2]$, 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 $\mathbb{R}^2$, мы получим $\delta(f)$, двойственное разбиение многогранника Ньютона.

5.7.2 Многогранники двухслойной нейронной сети

Продемонстрируем наши рассуждения в Разделе 6.2 на двухслойном примере. Пусть $\nu : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ 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

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

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

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

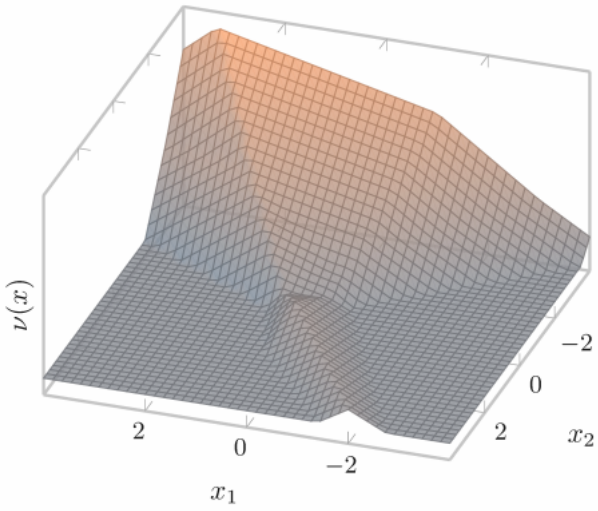
и

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

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

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

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 $\mathbb{R}^3$

Так как $F^{(1)} = G^{(1)} \oplus H^{(1)}, P(f_j^{(1)})$ — выпуклая оболочка двух точек, и является отрезком в $\mathbb{R}^3$. многогранники 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.

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:

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

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

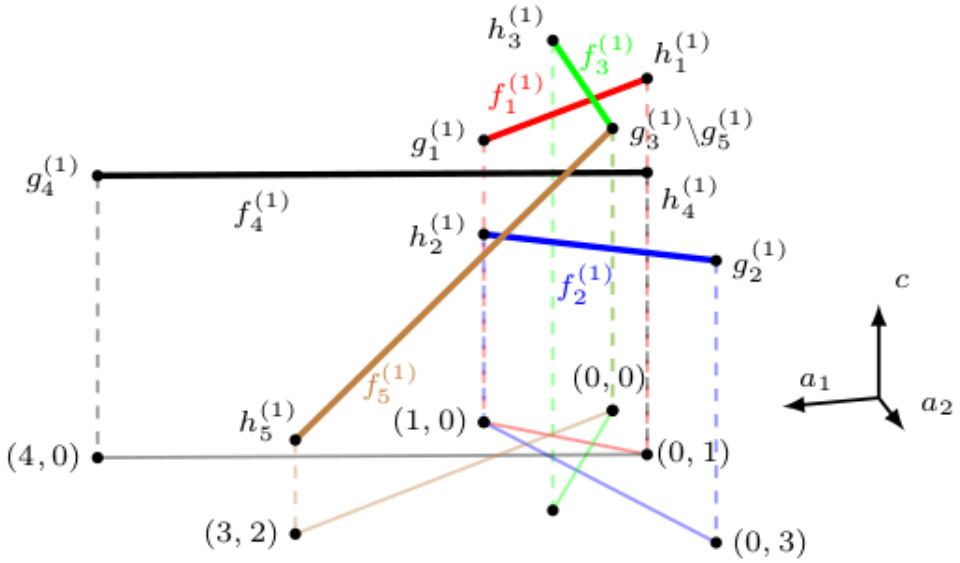


Рис. 4: $P(F^{(1)})$ и двойственное разбиение $F^{(1)}$

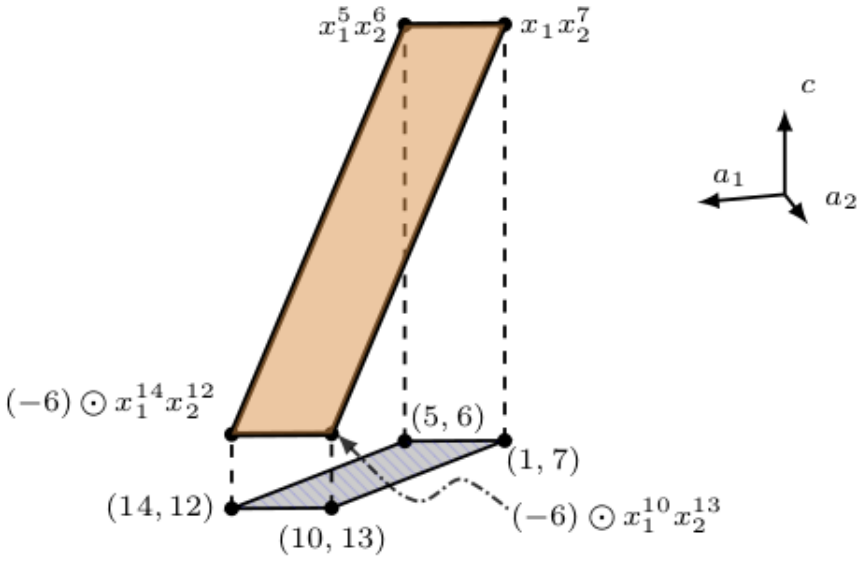


Рис. 5: $P(g^{(2)})$ и двойственное разбиение $g^{(2)}$

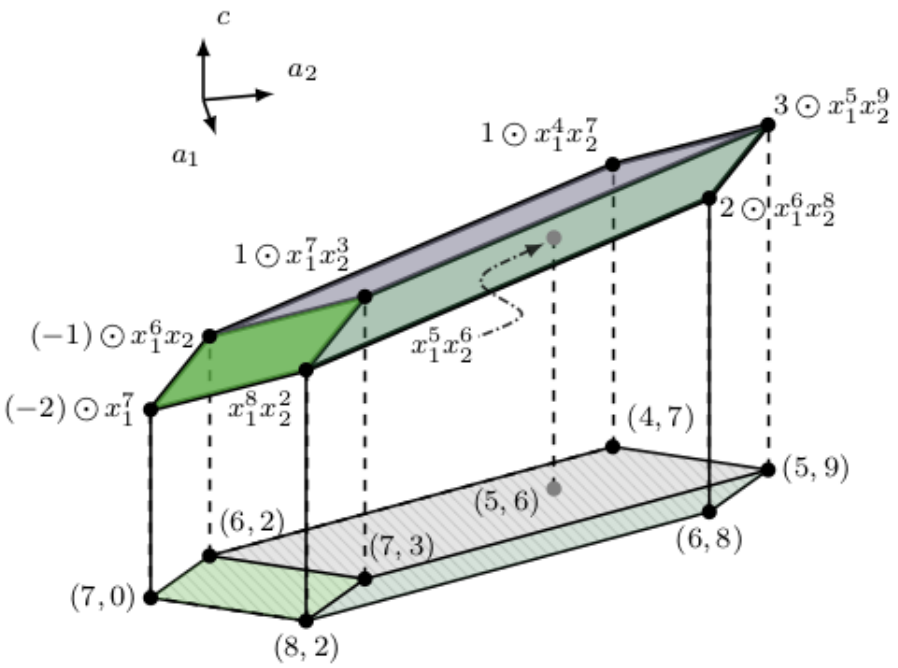


Рис. 6: Многогранник, связанный с $h^{(2)}$ и его двойственное разбиение

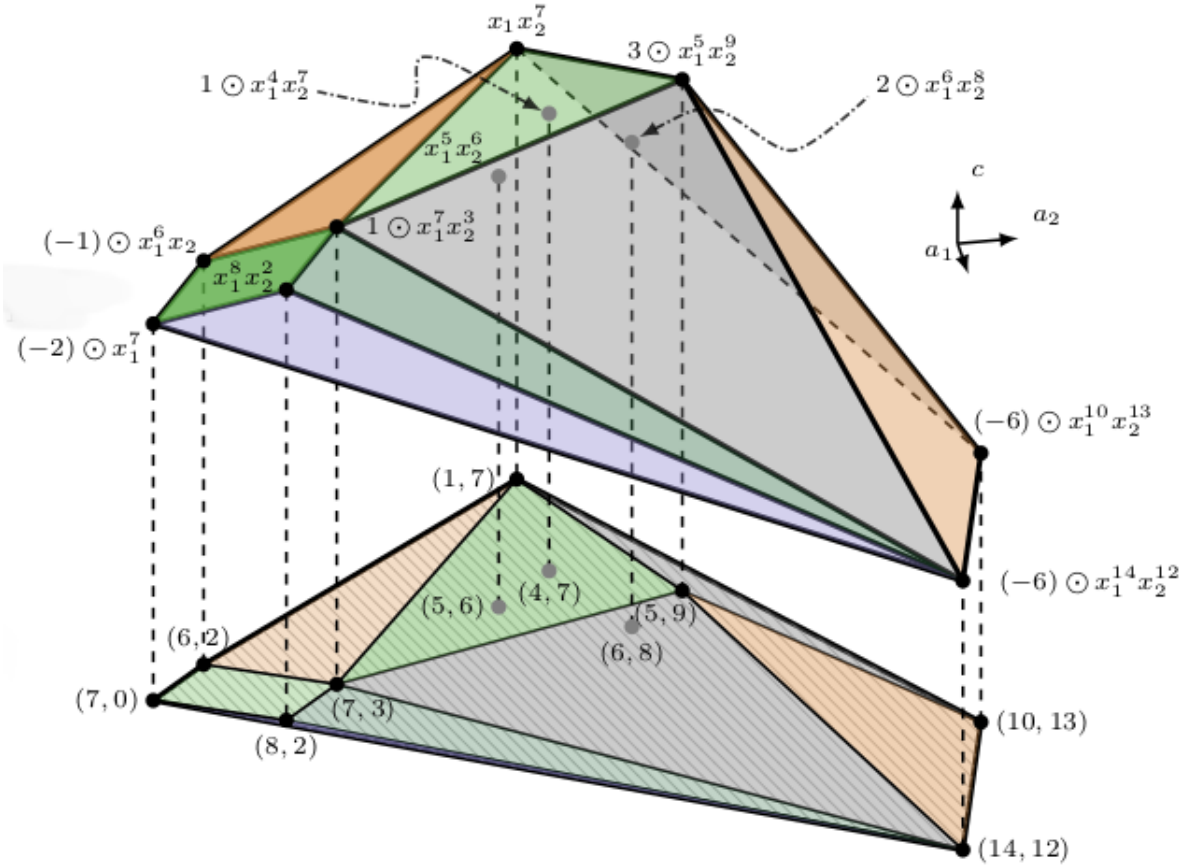


Рис. 7: $P(f^{(2)})$ и двойственное разбиение $f^{(2)}$