

Исследование топологических характеристик внутреннего пространства нейронной сети при уменьшении размера входного датасета

Томилов И.В. (ИТМО), Каданцев Г.В. (ИТМО)

Научный руководитель: кандидат технических наук, доцент Гусарова Н.Ф. (ИТМО)

Введение.

Топологический анализ данных — современный подход к анализу данных, который опирается на техники алгебраической топологии. Один из главных его методов — персистентные гомологии — успешно применяются для решения задач в различных областях, в том числе в машинном обучении. Классически эти методы применяются при исследовании данных, представленных облаком точек в многомерном пространстве. Предполагается, что данные берутся из некоего скрытого топологического подпространства, возможно с сложной структурой. Чтобы аппроксимировать это пространство с разной точностью, по облаку точек строится фильтрация. В результате получается графическое представление персистентных гомологий — персистентная диаграмма.

Этот подход имеет ряд преимуществ: персистентные гомологии имеют понятную интерпретацию для данных сколь угодно большой размерности, и они не меняются сильно при наличии в данных определенного объема шума. Мы используем этот подход в применении к задачам обучения нейронных сетей. Ранее на основе персистентных гомологий были созданы метрики для оценки сложности данных, чтобы определять подходящую архитектуру нейронной сети для поставленной задачи классификации. Тогда было выявлено, что способность нейронной сети к обобщению ограничивается топологической сложностью её поверхности решений (см. [1]), которая в свою очередь выражает сложность данных. Кроме этого, они могут быть использованы чтобы выявить избыточность архитектуры (см. [2])

Основная часть.

Мы исследуем, как меняются топологические характеристики обучаемых нейронных сетей при меняющемся объеме данных для задач бинарной классификации. Для этого мы предлагаем метод построения фильтрации для каждого слоя сети, основанный на косинусном расстоянии (следуя [3]). На каждом слое набор связанных с нейронным весов понимается как вектор, набор таких векторов — как облако точек, расположенных так, что расстояние между ними вычисляется как косинусное расстояние между векторами. Для анализа получающихся персистентных диаграмм используется ряд характеристик (персистентная энтропия, число гомологий различных размерностей и др.).

Мы обнаружили, что объем сокращения входных данных коррелирует с числом гомологий и персистентной энтропией, при этом имеет место пороговый эффект:

после определенного момента сокращение доступных для обучения данных приводит к резкому изменению внутренней топологии нейронной сети (это отражается в персистентной диаграмме). Это особенно сильно проявляется на последних слоях сети. Эти наблюдения подкреплены набором экспериментов на различных медицинских датасетах для бинарной классификации.

Выводы.

Был разработан новый метод анализа внутренней топологии нейронной сети и показана корреляция персистентной энтропии, количества гомологий и других характеристик с объемом сокращения входных данных для обучения.

Список использованной литературы.

1. W. H. Guss и R. Salakhutdinov, On Characterizing the Capacity of Neural Networks using Algebraic Topology, 2018. arXiv: 1802.04443 [cs.LG]
2. S. Watanabe и H. Yamana, «Topological measurement of deep neural networks using persistent homology,» *Annals of Mathematics and Artificial Intelligence*, т. 90, No 1, с. 75—92, 1 янв. 2022, issn: 1573-7470.
3. G. Jin, X. Yi, L. Zhang, L. Zhang, S. Schewe и X. Huang, How does Weight Correlation Affect the Generalisation Ability of Deep Neural Networks, 2020. arXiv: 2010.05983 [cs.LG].