

ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФГАОУ ВО НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
«ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

Факультет компьютерных наук
Образовательная программа «Прикладная математика и информатика»

УДК

Отчет об исследовательском проекте на тему:
Анализ сингулярных чисел сверточных слоев нейросетей

Выполнил:

студент группы БПМИ214
Гришина Екатерина Романовна


(подпись)

24.05.23
(дата)

Принял руководитель проекта:

к.ф.-м.н. Рахуба Максим Владимирович


(подпись)

24.05.23
(дата)

Содержание

Аннотация	3
1 Введение	4
2 Обзор литературы	5
3 Оценка сингулярных чисел	6
3.1 Определения	6
3.2 Бидиагональные матрицы	7
3.3 1D свертка	15
3.4 2D свертка	16
3.5 Многоканальная 2D свертка	19
4 Сходимость проекций	21
4.1 Определения	21
4.2 Проекции	21
4.3 Сходимость итерационного процесса	22
4.4 Выводы	24
5 Заключение	25
Список литературы	27

Аннотация

В данной работе проанализирована ошибка между сингулярными числами свертки-корреляции, которая используется в нейросетях на практике, и периодической свертки, с помощью которой можно эффективно вычислять и ограничивать сингулярные числа. Получена верхняя оценка для разности сингулярных чисел этих двух типов сверток в одномерном и многоканальном двумерном случае. Для бидиагональной матрицы Теплица (одномерной свертки-корреляции) найдены точные значения сингулярных чисел и более близкая оценка. Также сделана оценка сингулярных чисел свертки-корреляции с помощью оптимальных циркулянтов. Кроме того, обоснована сходимость метода ограничения сингулярных чисел, предложенного в статье [6], при его применении к свертке-корреляции.

Ключевые слова

Сингулярное разложение, матрица Теплица, циркулянт, корреляция, периодическая свертка, машинное обучение, нейронные сети.

1 Введение

Ключевым компонентом сверточных нейронных сетей является операция свертки, которую можно представить, как умножение на матрицу, имеющую особую структуру. В ряде работ [8], [10], [7], [5] было доказано, что от сингулярных чисел матриц сверточных слоев зависит обобщающая способность нейросети и ее обучаемость.

Существует несколько видов сверток: периодическая, линейная и корреляция [3]. Применение операции свертки представляется, как умножение на блочную матрицу с дважды теплицевыми блоками в случае линейной свертки или дважды циркулянтными блоками в случае периодической. (Матрица для свертки-корреляции с паддингом совпадает с матрицей для линейной свертки с перевернутым ядром, поэтому достаточно исследовать сингулярные числа одной из них). Размер таких матриц растет с увеличением размера входных данных, поэтому построение матриц и получение полного сингулярного разложения требует слишком много памяти и времени и нецелесообразно для использования в процессе обучения нейросети.

Для поиска и ограничения сингулярных чисел 2D периодической свертки был предложен эффективный алгоритм в статье [6]. К ядру свертки применяется преобразование Фурье и у полученного тензора делается сингулярное разложение. Далее можно ограничить полученные сингулярные числа и обратным преобразованием получить новое ядро. Авторы показали, что итерационное применение такого преобразования сходится к матрице с ограниченными сингулярными числами.

Но встает вопрос, насколько близки сингулярные числа периодической и линейной сверток. Например, в статье [9] была найдена асимптотическая оценка для разности сингулярных чисел двух сверток с помощью расширенной теоремы Сегё.

В данной работе получена более точная оценка для разности сингулярных чисел периодической свертки и корреляции с помощью неравенства Виландта-Хоффмана в случае 1D сверток

$$\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^k (\sigma_i(T) - \sigma_i(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \sqrt{\frac{r-1}{2n-r+1}},$$

и в случае 2D и 2D многоканальной сверток

$$\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^k (\sigma_i(T) - \sigma_i(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{2\sqrt{n(r-1)}}{2n-r+1}.$$

Эта оценка по асимптотике совпадает с результатами [9], хотя на практике у некоторых

матриц весов нейросетей асимптотика данного выражения может быть $O(\frac{1}{n})$. Также сделана оценка сингулярных чисел матриц Теплица с помощью оптимальных циркулянтов [1].

Отдельно рассмотрен случай для bidiagonalных матриц, соответствующих 1D свертке. Найдены точные значения и более точная оценка $O(\frac{1}{n})$ сингулярных чисел матрицы Теплица.

Обоснована сходимость метода, предложенного в статье [6], для свертки-корреляции.

2 Обзор литературы

Одним из препятствий при обучении сверточных нейросетей является взрыв или затухание градиентов. Авторы публикации [8] доказали, что если все сингулярные числа матриц близки к 1, то градиенты не взрываются и не затухают, и при таких условиях можно обучать глубокие модели с тысячами слоев без потери в качестве.

Другим важным аспектом является обобщающая способность моделей. В работе [5] было показано, что ошибка обобщения ограничена сверху спектральной и Фробениусовой нормами матриц весов, поэтому ограничение сингулярных чисел улучшает обобщающую способность нейросети. В [10] тоже было доказано, что снижение спектральной нормы повышает устойчивость модели к возмущенным входным данным.

То есть в многих публикациях приводится доказательство того, что с помощью контроля сингулярных чисел матриц весов можно получить модели, которые хорошо обобщают данные и которые легко обучать. Но подсчет полного сингулярного разложения требует слишком много памяти и времени, поэтому исследователи сосредоточены на поиске других методов. Так авторы статьи [6] нашли эффективный алгоритм для точного вычисления и ограничения сингулярных чисел периодической свертки. В работе [7] были найдены дифференцируемые верхние оценки для сингулярных чисел периодической свертки, которые можно использовать для регуляризации. В публикации [8] авторы предложили алгоритм для инициализации периодических сверточных слоев нейросети случайными ортогональными матрицами.

Однако на практике часто используются другие типы сверток (линейная свертка или корреляция). В работе [9] было доказано, что сингулярные числа дважды блочного циркулянта и дважды блочной матрицы Теплица с одним и тем же ядром асимптотически близки, а также был предложен алгоритм и верхние оценки для приближенного вычисления сингулярных чисел дважды Теплицевой матрицы.

3 Оценка сингулярных чисел

3.1 Определения

Определение 1. Матрица называется циркулянтном, если она имеет вид

$$C = \begin{bmatrix} c_0 & c_1 & c_2 & \dots & c_{n-1} \\ c_{n-1} & c_0 & c_1 & \dots & c_{n-2} \\ c_{n-2} & c_{n-1} & c_0 & \dots & c_{n-3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_1 & c_2 & c_3 & \dots & c_0 \end{bmatrix}$$

Определение 2. Матрица называется матрицей Тейлица, если она имеет вид

$$T = \begin{bmatrix} t_0 & t_1 & t_2 & \dots & t_{n-1} \\ t_{-1} & t_0 & t_1 & \dots & t_{n-2} \\ t_{-2} & t_{-1} & t_0 & \dots & t_{n-3} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ t_{-n+1} & t_{-n+2} & t_{-n+3} & \dots & t_0 \end{bmatrix}$$

Определение 3. Сингулярным разложением матрицы $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ называется разложение вида

$$A = U\Sigma V^*$$

где $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$ и $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$ - ортогональные матрицы, $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$ - диагональная матрица с вещественными числами $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ на диагонали. Числа $\sigma_1 \dots \sigma_r$ называются сингулярными числами матрицы A .

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & \sigma_r & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 0 \end{bmatrix}$$

Определение 4. *Нормой Фробениуса матрицы $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ называется*

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}$$

Определение 5. *Спектральной нормой матрицы $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ называется*

$$\|A\|_2 = \sup_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sigma_1(A)$$

Определение 6. *Оптимальным циркулянтном для теплицевой матрицы T назовем циркулянт C_{opt} , ближайший к T по норме Фробениуса, то есть*

$$C_{opt} = \arg \min_{C \text{ циркулянт}} \|T - C\|_F.$$

Значения элементов оптимального циркулянта C_{opt} задаются формулой [1]

$$c_i = \frac{it_{-(n-i)} + (n-i)t_i}{n}.$$

Теорема 1. *Для матриц $A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$ с соответствующими сингулярными числами $s_1(A) \geq \dots \geq s_r(A)$ и $s_1(B) \geq \dots \geq s_r(B)$, $r = \min(m, n)$ выполняется неравенство Виландта-Хоффмана*

$$\sum_{i=1}^r (s_i(A) - s_i(B))^2 = \min_{\sigma \in S_r} \sum_{i=1}^r (s_i(A) - s_{\sigma(i)}(B))^2 \leq \|A - B\|_F^2$$

3.2 Бидиагональные матрицы

В случае, если матрицы для 1D свертки имеют всего две ненулевые диагонали, можно найти явное выражение для сингулярных чисел. Пусть матрицы $T, C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - бидиагональная матрица Теплица и циркулянт.

$$T = \begin{bmatrix} t_0 & t_1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & t_1 & \\ & & & \ddots & t_0 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$C = \begin{bmatrix} t_0 & t_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & t_1 \\ t_1 & & & t_0 \end{bmatrix} \quad (2)$$

Лемма 1. Сингулярные числа для бидиагонального циркулянта $C \in \mathbb{R}^{n \times n}$ имеют вид

$$\sigma_k = \sqrt{\lambda_k}, \quad k = 1 \dots n,$$

$$\lambda_k = t_0^2 + t_1^2 + 2t_0t_1 \cos\left(\frac{2\pi(k-1)}{n}\right).$$

Лемма 2. Сингулярные числа для бидиагональной матрицы Тёплица задаются уравнениями

$$\sigma_k = \sqrt{\lambda_k},$$

$$\lambda_k = t_0^2 + t_1^2 + 2t_0t_1 \cos \theta_k,$$

где углы θ_k являются корнями уравнения

$$t_0 \sin((n+1)\theta_k) + t_1 \sin(n\theta_k) = 0.$$

Доказательство.

$$A = TT^t = \begin{bmatrix} t_0^2 + t_1^2 & t_0t_1 & & \\ t_0t_1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & t_0^2 + t_1^2 & t_0t_1 \\ & & t_0t_1 & t_0^2 \end{bmatrix}$$

Воспользовавшись результатами [11] получим, что собственные значения матрицы A имеют вид

$$\lambda_k = t_0^2 + t_1^2 + 2t_0t_1 \cos \theta_k,$$

где углы θ_k являются корнями уравнения

$$t_0 \sin((n+1)\theta_k) + t_1 \sin(n\theta_k) = 0.$$

Тогда сингулярные числа матрицы T равны $\sigma_k = \sqrt{\lambda_k}$. □

Для сингулярных чисел бидиагональных матриц неравенство Виландта-Хоффмана

будет иметь вид

$$\sum_{k=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2 \leq \|T - C\|^2 = t_1^2,$$

$$\frac{\sqrt{\sum_{k=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{|t_1|}{\sqrt{nt_0^2 + (n-1)t_1^2}} \quad (3)$$

Однако с помощью следующих теорем можно улучшить оценку левой части неравенства.

Теорема 2. Пусть сингулярные числа отсортированы по убыванию, то есть $\forall k \sigma_k \geq \sigma_{k+1}$.

И пусть $x = \frac{t_1}{t_0}$, $|x| < 1$. Тогда

$$|\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| \leq \frac{2\pi|t_0|}{2n+1} \leq \frac{\pi|t_0|}{n}.$$

Доказательство. Из условия $|\frac{t_1}{t_0}| \leq 1$ следует, что $|\frac{\sin((n+1)\theta_k)}{\sin(n\theta_k)}| \leq 1$. Тогда

$$\frac{2\pi k - \pi}{2n+1} \leq \theta_k \leq \frac{2\pi k}{2n+1}, \quad k = 1 \dots n.$$

Сингулярные числа для матриц T и C будут иметь вид

$$\sigma_k(T) = \sqrt{t_0^2 + t_1^2 + 2t_0t_1 \cos \theta_k} = |t_0| \sqrt{1 + x^2 + 2x \cos \theta_k}, \quad k = 1 \dots n$$

$$\sigma_k(C) = |t_0| \sqrt{1 + x^2 + 2x \cos \phi_k}, \quad \phi_k = \frac{2\pi \lfloor \frac{k}{2} \rfloor}{n}, \quad k = 1 \dots n$$

Оценим разность k-ых сингулярных чисел C и T

$$\begin{aligned} \frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| &= |\sqrt{1 + x^2 + 2x \cos \theta_k} - \sqrt{1 + x^2 + 2x \cos \phi_k}| = \\ &= \frac{2|x| |\cos \theta_k - \cos \phi_k|}{\sqrt{1 + x^2 + 2x \cos \theta_k} + \sqrt{1 + x^2 + 2x \cos \phi_k}} \leq \frac{2|\cos \theta_k - \cos \phi_k|}{\sqrt{2 - 2|\cos \theta_k|} + \sqrt{2 - 2|\cos \phi_k|}} \end{aligned}$$

Далее рассмотрим по случаям.

1 случай. $0 < \theta_k < \frac{\pi}{2}, 0 < \phi_k < \frac{\pi}{2}$

$$\begin{aligned} \frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| &\leq \frac{2|\cos \theta_k - \cos \phi_k|}{\sqrt{2 - 2\cos \theta_k} + \sqrt{2 - 2\cos \phi_k}} = \frac{|\cos \theta_k - \cos \phi_k|}{\sin \frac{\theta_k}{2} + \sin \frac{\phi_k}{2}} = \frac{2|\sin \frac{\theta_k + \phi_k}{2} \sin \frac{\theta_k - \phi_k}{2}|}{2 \sin \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k - \phi_k}{4}} = \\ &= \frac{4|\sin \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k - \phi_k}{4}|}{\sin \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k - \phi_k}{4}} = 4|\cos \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4}| \leq 4|\sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4}| \end{aligned}$$

2 случай. $\frac{\pi}{2} \leq \theta_k \leq \pi, \frac{\pi}{2} \leq \phi_k \leq \pi$

$$\begin{aligned} \frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| &\leq \frac{2|\cos \theta_k - \cos \phi_k|}{\sqrt{2+2\cos \theta_k} + \sqrt{2+2\cos \phi_k}} = \frac{|\cos \theta_k - \cos \phi_k|}{\cos \frac{\theta_k}{2} + \cos \frac{\phi_k}{2}} = \frac{2|\sin \frac{\theta_k + \phi_k}{2} \sin \frac{\theta_k - \phi_k}{2}|}{2 \cos \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k - \phi_k}{4}} = \\ &= \frac{4|\sin \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k - \phi_k}{4}|}{\cos \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \cos \frac{\theta_k - \phi_k}{4}} = 4|\sin \frac{\theta_k + \phi_k}{4} \sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4}| \leq 4|\sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4}| \end{aligned}$$

Оценим $\theta_k - \phi_k$. Если k - нечетное, то

$$\frac{2\pi k - \pi}{2n+1} - \frac{\pi(k-1)}{n} \leq \theta_k - \phi_k \leq \frac{2\pi k}{2n+1} - \frac{\pi(k-1)}{n} \Leftrightarrow \frac{\pi(n-k+1)}{n(2n+1)} \leq \theta_k - \phi_k \leq \frac{\pi(2n-k+1)}{n(2n+1)}$$

Если k - четное, то

$$\frac{2\pi k - \pi}{2n+1} - \frac{\pi k}{n} \leq \theta_k - \phi_k \leq \frac{2\pi k}{2n+1} - \frac{\pi k}{n} \Leftrightarrow -\frac{\pi(n+k)}{n(2n+1)} \leq \theta_k - \phi_k \leq -\frac{\pi k}{n(2n+1)}$$

Тогда можно оценить разность сингулярных чисел

$$\frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| \leq 4|\sin \frac{\theta_k - \phi_k}{4}| \leq |\theta_k - \phi_k| \leq \frac{2\pi}{2n+1} \leq \frac{\pi}{n}$$

□

Теорема 3. Пусть сингулярные числа отсортированы по убыванию, то есть $\forall k \sigma_k \geq \sigma_{k+1}$.

Обозначим $x = \frac{t_1}{t_0}$. Пусть $|x| = 1 + \varepsilon, \varepsilon > 0$. Тогда для всех $k < n$ при нечетных k

$$|\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| \leq \frac{|t_0|}{\varepsilon n},$$

при четных k

$$|\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| \leq \frac{|t_0|(\pi(1+\varepsilon)+1)}{\varepsilon n}.$$

Доказательство. Углы θ_k задаются уравнением

$$t_0 \sin((n+1)\theta_k) + t_1 \sin(n\theta_k) = 0.$$

Поделив на t_1 , получим

$$|\sin(n\theta_k)| = \left| \frac{-t_0 \sin((n+1)\theta_k)}{t_1} \right| = \left| \frac{\sin((n+1)\theta_k)}{x} \right| \leq \frac{1}{1+\varepsilon}.$$

Для краткости обозначим $\beta = \arcsin(\frac{1}{1+\varepsilon})$. Из неравенства получаем, что

$$\frac{\pi(k-1) - \beta}{n} \leq \theta_k \leq \frac{\pi(k-1) + \beta}{n}, \quad k = 1 \dots (n-1).$$

Можно оценить разность сингулярных чисел

$$\begin{aligned} \frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| &= \left| \sqrt{1+x^2+2x\cos\theta_k} - \sqrt{1+x^2+2x\cos\phi_k} \right| = \\ &= \frac{2|x| |\cos\theta_k - \cos\phi_k|}{\sqrt{1+x^2+2x\cos\theta_k} + \sqrt{1+x^2+2x\cos\phi_k}} = \frac{2|\cos\theta_k - \cos\phi_k|}{\sqrt{(1+\frac{\cos\theta_k}{x})^2 + (\frac{\sin\theta_k}{n})^2} + \sqrt{(1+\frac{\cos\phi_k}{x})^2 + (\frac{\sin\phi_k}{n})^2}} \leq \\ &\leq \left| \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} \right| |\cos\theta_k - \cos\phi_k| = 2 \left| \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} \sin\frac{\theta_k+\phi_k}{2} \sin\frac{\theta_k-\phi_k}{2} \right| \end{aligned}$$

Если k - нечетное, то $\phi_k = \frac{\pi(k-1)}{n}$. Тогда

$$\frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| \leq 2 \left| \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} \sin\frac{\beta}{2n} \right| \max \left(\left| \sin\frac{2\pi(k-1) - \beta}{2n} \right|, \left| \sin\frac{2\pi(k-1) + \beta}{2n} \right| \right) \leq \frac{1}{\varepsilon n}$$

Если k - четное, то $\phi_k = \frac{\pi k}{n}$. Тогда

$$\frac{1}{|t_0|} |\sigma_k(T) - \sigma_k(C)| \leq 2 \left| \frac{1+\varepsilon}{\varepsilon} \sin\frac{\pi+\beta}{2n} \right| \max \left(\left| \sin\frac{2\pi k - \pi - \beta}{2n} \right|, \left| \sin\frac{2\pi k - \pi + \beta}{2n} \right| \right) \leq \frac{\pi(1+\varepsilon) + 1}{\varepsilon n}$$

□

Теорема 4. Расстояние по норме $\|\cdot\|_2$ от квадратной матрицы $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ до множества вырожденных матриц равно $\sigma_n(A)$.

$$\sigma_n(A) = \min_{rk B < n} \|A - B\|_2.$$

Доказательство. Если A вырожденная, то, очевидно, равенство выполнено $\min_{rk B < n} \|A - B\|_2 = 0 = \sigma_n(A)$. Пусть A невырожденная и ее сингулярное разложение имеет вид

$$A = U \Sigma V^*.$$

Так как $\dim \ker(B) = n - rk(B)$, а размерность линейной оболочки столбцов V равна n , то найдется вектор $y \neq 0$, принадлежащий пересечению ядра матрицы B и линейной оболочки столбцов матрицы V

$$y \in \ker(B) \cap \langle v_1 \dots v_n \rangle.$$

Пусть $\|y\|_2 = 1$. Тогда

$$\|A - B\|_2 \geq \|(A - B)y\|_2 = \|Ay\|_2 = \|U\Sigma V^T y\|_2 = \|\Sigma V^T y\|_2 \geq \sigma_n(A) \|V^* y\|_2 = \sigma_n(A).$$

Пусть Σ' - матрица, полученная из Σ заменой последнего сингулярного числа на ноль. Тогда, очевидно, в неравенстве выше достигается равенство при

$$B = U\Sigma'V^*.$$

□

Теорема 5. Пусть T - bidiagonalная матрица Тейлица (1). Тогда можно оценить последнее сингулярное число

$$0 \leq \sigma_n \leq \frac{|t_0|^n}{|t_1|^{n-1}}$$

Доказательство. Пусть матрица T' отличается от T только в позиции $(n, 1)$, то есть $T'_{n,1} = \epsilon$, $T'_{i,j} = T_{i,j}$.

$$T' = \begin{bmatrix} t_0 & t_1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & t_1 \\ \epsilon & & & & t_0 \end{bmatrix}$$

Найдем такое ϵ , что T' будет вырожденной.

$$\det(T') = t_0^n + \epsilon(-1)^{n+1}t_1^{n-1}$$

Тогда T' будет вырожденной при

$$\epsilon = \frac{(-1)^n t_0^n}{t_1^{n-1}}.$$

По теореме 4

$$\sigma_n \leq \|T - T'\|_2 = |\epsilon| = \frac{|t_0|^n}{|t_1|^{n-1}}$$

□

Сделаем оценку для левой части неравенства Виландта-Хоффмана. Если $|\frac{t_1}{t_0}| \leq 1$, то по теореме 2

$$\sum_{k=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2 \leq n \left(\frac{\pi |t_0|}{n} \right)^2 = \frac{\pi^2 t_0^2}{n}.$$

Взяв корень и поделив на $\|T\|_F$, получим

$$\frac{\sqrt{\sum_{k=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{\pi|t_0|}{\sqrt{n}\sqrt{nt_0^2 + (n-1)t_1^2}} = O\left(\frac{1}{n}\right).$$

Если $|\frac{t_1}{t_0}| = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon > 0$, то по теореме 3

$$\sum_{i=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2 \leq \frac{|t_0|^2(\pi(1 + \varepsilon) + 1)^2}{\varepsilon^2 n} + (\sigma_n(T) - \sigma_n(C))^2.$$

При $|\frac{t_1}{t_0}| > 1$ по теореме 5 наименьшее сингулярное число bidiagonalной матрицы Тейлица с ростом n экспоненциально стремится к нулю, $\sigma_n(T) \rightarrow 0$. При этом наименьшее сингулярное число циркулянта равно

$$\sigma_n(C) = \begin{cases} |t_0 - t_1| \leq |t_0| + |t_1| & \text{при четных } k \\ \sqrt{t_0^2 + t_1^2 - 2t_0t_1 \cos \frac{\pi}{n}} \leq |t_0| + |t_1| & \text{при нечетных } k \end{cases}$$

То есть при обычных условиях если $|\frac{t_1}{t_0}| = 1 + \varepsilon$, $\varepsilon > 0$, то

$$\sum_{k=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2 \leq \frac{|t_0|^2(\pi(1 + \varepsilon) + 1)^2}{\varepsilon^2 n} + (|t_0| + |t_1|)^2,$$

$$\frac{\sqrt{\sum_{k=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2}}{\|T\|_F} = O\left(\frac{|t_0| + |t_1|}{\sqrt{nt_0^2 + (n-1)t_1^2}}\right) = O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right).$$

Однако, если заменить наименьшее сингулярное число циркулянта на ноль, то можно улучшить оценку

$$\sum_{k=1}^{n-1} (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2 + (\sigma_n(T) - 0)^2 \leq \frac{|t_0|^2(\pi(1 + \varepsilon) + 1)^2}{\varepsilon^2 n} + \left(\frac{|t_0|^n}{|t_1|^{n-1}}\right)^2,$$

$$\frac{\sqrt{\sum_{k=1}^{n-1} (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2 + (\sigma_n(T) - 0)^2}}{\|T\|_F} = O\left(\frac{|t_0|(\pi(1 + \varepsilon) + 1)}{\varepsilon\sqrt{n}\sqrt{nt_0^2 + (n-1)t_1^2}}\right) = O\left(\frac{1}{n}\right).$$

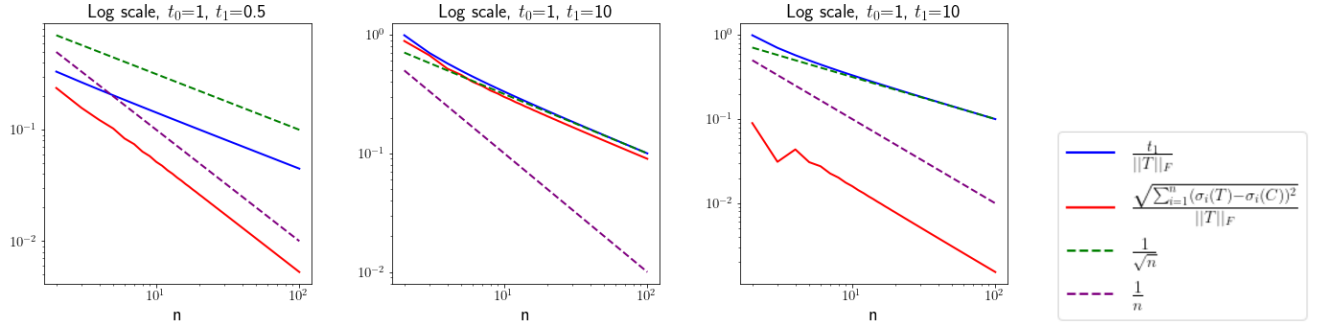


Рис. 3.1: Графики показывают левую и правую части неравенства 3 для bidiagonal матриц в зависимости от n . На левом графике отношение $|\frac{t_1}{t_0}| < 1$, на среднем графике $|\frac{t_1}{t_0}| > 1$, поэтому видна разница в сходимости левой части неравенства. На среднем и правом графиках красным показана асимптотика левой части неравенства 3 при одних и тех же значениях t_0 и t_1 , но на правом графике последнее сингулярное число циркулянта заменено на ноль. Из-за этого на среднем графике асимптотика $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$, на правом $O(\frac{1}{n})$.

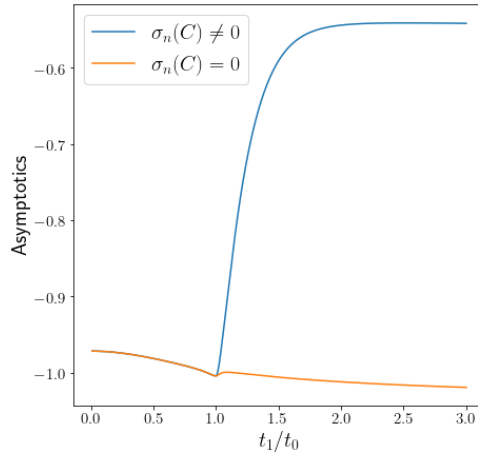


Рис. 3.2: График показывает асимптотику выражения $\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^n (\sigma_k(T) - \sigma_k(C))^2}}{\|T\|_F}$ в зависимости от $|\frac{t_1}{t_0}|$. Рыжим цветом показана асимптотика, если при $|\frac{t_1}{t_0}| > 1$ заменить последнее сингулярное число циркулянта на ноль. При $|\frac{t_1}{t_0}| \leq 1$ графики совпадают. Видно, что при $|\frac{t_1}{t_0}| \leq 1$ асимптотика примерно $O(n^{-1})$, а при $|\frac{t_1}{t_0}| > 1$ асимптотика стремится к $O(n^{-0.5})$, если не заменять $\sigma_n(C)$ на ноль.

3.3 1D свертка

Формула свертки корреляции [3]

$$Y_m = \sum_{i=0}^{r-1} f_i X_{m+i}$$

Формула периодической свертки [3]

$$Y_m = \sum_{i=0}^{r-1} f_i X_{m-i(\text{mod } n)}$$

Пусть $F \in \mathbb{R}^r$ - фильтр, $X \in \mathbb{R}^n$ - входной вектор. Дополним X нулями до размера $(n+r-1)$ и применим к нему корреляцию. Обозначим размер паддинга $p = \lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor$. Получим свертку $Y = TX$, $Y \in \mathbb{R}^n$. Матрица преобразования $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ имеет вид

$$T = \begin{bmatrix} f_p & \dots & f_{r-1} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ f_0 & & \ddots & & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & & \ddots & & f_{r-1} \\ \vdots & \ddots & \ddots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & f_0 & \dots & f_p \end{bmatrix}$$

Построим для матрицы T соответствующий циркулянт C .

$$C = \begin{bmatrix} f_p & \dots & f_{r-1} & 0 & f_0 & \dots & f_{p-1} \\ \vdots & \ddots & & \ddots & & \ddots & \vdots \\ f_0 & & \ddots & & \ddots & & f_0 \\ 0 & \ddots & & \ddots & & \ddots & 0 \\ f_{r-1} & & \ddots & & \ddots & & f_{r-1} \\ \vdots & \ddots & & \ddots & & \ddots & \vdots \\ f_{p+1} & \dots & f_{r-1} & 0 & f_0 & \dots & f_p \end{bmatrix}$$

Запишем неравенство Виландта-Хоффмана

$$\sum_{i=1}^k (\sigma_i(T) - \sigma_i(C))^2 \leq \|T - C\|_F^2 = \sum_{j=1}^{r-1} |p-j| f_j^2$$

Взяв корень и поделив на $\|T\|_F$, получим

$$\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^k (\sigma_i(T) - \sigma_i(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{\|T - C\|_F}{\|T\|_F} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{r-1} |p-j| f_j^2}{\sum_{i=0}^{r-1} (n-|p-i|) f_i^2}} \leq \sqrt{\frac{p}{n-p}} = \sqrt{\frac{r-1}{2n-r+1}} \quad (4)$$

Для соответствующего матрице T оптимального циркулянта C_{opt} (определение 6) оценка примет вид

$$\frac{\sqrt{\sum_{i=1}^k (\sigma_i(T) - \sigma_i(C_{opt}))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{\|T - C_{opt}\|_F}{\|T\|_F} = \sqrt{\frac{\sum_{j=1}^{r-1} \frac{|p-i|(n-|p-i|)}{n} f_j^2}{\sum_{i=0}^{r-1} (n-|p-i|) f_i^2}} \leq \sqrt{\frac{p}{n}} = \sqrt{\frac{r-1}{2n}}$$

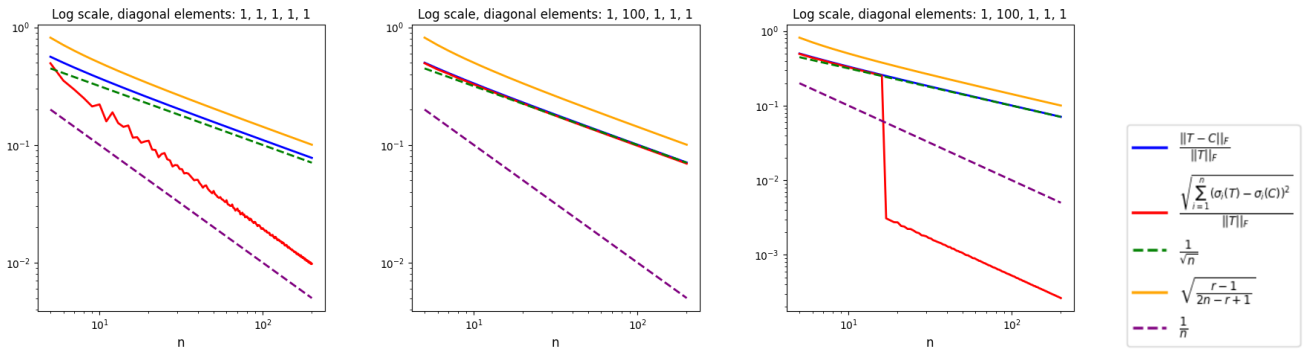


Рис. 3.3: Графики показывают левую и правую части неравенства 4 в зависимости от размера матрицы n (в логарифмическом масштабе по обеим осям). Рыжим цветом показана оценка сверху для левой и правой частей неравенства. По левому и среднему графикам заметно, что в зависимости от значений диагональных элементов у левой части неравенства может быть разная скорость сходимости. На правом графике красным цветом показана асимптотика левой части неравенства 4, если несколько последних сингулярных чисел циркулянта, для которых сингулярные числа матрицы Теплица с такими же порядковыми номерами близки к нулю, заменить на ноль. Видно, что тогда асимптотика левой части неравенства равна $O(\frac{1}{n})$, а не $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$.

3.4 2D свертка

Формула корреляции

$$Y_{lm} = \sum_{i=0}^{r-1} \sum_{j=0}^{r-1} f_{ij} X_{l+i, m+j}$$

Формула периодической свертки

$$Y_{lm} = \sum_{i=0}^{r-1} \sum_{j=0}^{r-1} f_{ij} X_{l-i(\text{mod } n), m-j(\text{mod } n)}$$

Пусть $F \in \mathbb{R}^{r \times r}$ - фильтр, $X \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - входная матрица. Дополним X нулями до размера $(n + r - 1) \times (n + r - 1)$ и применим корреляцию. (Обозначим размер паддинга $p = \lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor$). Получим результат $Y \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $vec(Y) = Tvec(X)$, где $vec(X) \in \mathbb{R}^{n^2 \times 1}$ - запись матрицы X по столбцам в вектор. Матрица преобразования $T \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$ - блочная теплицева с теплицевыми блоками $T_i \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

$$T = \begin{bmatrix} T_0 & T_1 & \dots & T_{n-1} \\ T_{-1} & T_0 & \dots & T_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{-n+1} & T_{-n+2} & \dots & T_0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$T_i = 0$ при $i < -p$ или $i > p$, иначе

$$T_i = \begin{bmatrix} f_{i+p,p} & \dots & f_{i+p,r-1} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & & \ddots & \ddots & \vdots \\ f_{i+p,0} & & \ddots & & \ddots & 0 \\ 0 & \ddots & & \ddots & & f_{i+p,r-1} \\ \vdots & \ddots & \ddots & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & f_{i+p,0} & \dots & f_{i+p,p} \end{bmatrix}$$

Построим для T соответствующий блочный циркулянт с циркулянтными блоками C .

$$C = \begin{bmatrix} C_0 & C_1 & \dots & C_{n-1} \\ C_{n-1} & C_0 & \dots & C_{n-2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_1 & C_2 & \dots & C_0 \end{bmatrix}$$

Обозначим $Circ(x_1 \dots x_n)$ циркулянт с первым столбцом $(x_1 \dots x_n)^T$.

$$C_i = \begin{cases} Circ(f_{i+p,p} \dots f_{i+p,0} 0 \dots 0 f_{i+p,r-1} \dots f_{i+p,p+1}) & \text{при } i < r - p \\ Circ(f_{p-n+i,p} \dots f_{p-n+i,0} 0 \dots 0 f_{p-n+i,r-1} \dots f_{p-n+i,p+1}) & \text{при } i > n - p - 1 \\ 0 & \text{иначе} \end{cases}$$

Запишем неравенство Виландта-Хоффмана

$$\begin{aligned} \sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C))^2 &\leq \|T - C\|_F^2 = \sum_{i=0}^{r-1} (n - |p - i|) \sum_{j=0}^{r-1} |p - j| f_{i,j}^2 + \sum_{i=0}^{r-1} |p - i| \sum_{j=0}^{r-1} n f_{i,j}^2 = \\ &= \sum_{i,j=0}^{r-1} f_{i,j}^2 ((n - |p - i|)|p - j| + n|p - i|) \leq 2np \sum_{i,j=0}^{r-1} f_{i,j}^2 = 2np \|F\|^2 \end{aligned}$$

Найдем норму Фробениуса теплицевой матрицы T .

$$\|T\|_F^2 = \sum_{i,j=0}^{r-1} (n - |p - i|)(n - |p - j|) f_{i,j}^2 \geq (n - p)^2 \sum_{i,j=0}^{r-1} f_{i,j}^2 = (n - p)^2 \|F\|^2$$

Теперь сделаем оценку с помощью двух предыдущих неравенств.

$$\frac{\sqrt{\sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{\sqrt{2np} \|F\|_F}{(n - p) \|F\|_F} = \frac{2\sqrt{n(r-1)}}{2n - r + 1} \quad (6)$$

Лемма 3. Пусть $T \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$ - дважды теплицева матрица со страйдом s . Тогда дважды циркулянт $C_{opt} \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$ с элементами

$$C_{opt_{ki}} = \frac{\left(\frac{n}{s} - \lfloor \frac{k}{s} \rfloor\right) \left(\left(\frac{n}{s} - \lfloor \frac{i}{s} \rfloor\right) T_{k,i} + \lfloor \frac{i}{s} \rfloor T_{k, -(n-i)}\right) + \lfloor \frac{k}{s} \rfloor \left(\left(\frac{n}{s} - \lfloor \frac{i}{s} \rfloor\right) T_{-(\lfloor n/s \rfloor - k), i} + \lfloor \frac{i}{s} \rfloor T_{-(\lfloor n/s \rfloor - k), -(n-i)}\right)}{\left(\frac{n}{s}\right)^2}$$

является проекцией матрицы T на множество дважды циркулянтов $\mathcal{C}_{1,r}$, то есть

$$C_{opt} = \arg \min_{X \in \mathcal{C}_{1,r}} \|T - X\|_F.$$

Назовем такую матрицу C_{opt} оптимальным дважды циркулянтом.

Доказательство. Аналогично доказательству теоремы об оптимальном циркулянте для матрицы Теплица из статьи [1]. Нужно записать $\|T - X\|_F^2$ через элементы матриц и с помощью производной найти точку минимума. \square

Если в неравенстве 6 заменить C на оптимальный дважды циркулянт C_{opt} (лемма 3),

ТО МОЖНО ПОЛУЧИТЬ ОЦЕНКУ

$$\begin{aligned}
\sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C_{opt}))^2 &\leq \|T - C_{opt}\|_F^2 = \sum_{i=0}^{r-1} (n - |p - i|) \sum_{j=0}^{r-1} |p - j| \frac{(n - |p - i|)^2 (n - |p - j|)^2}{n^4} f_{i,j}^2 + \\
&+ \sum_{i=0}^{r-1} (n - |p - i|) \sum_{j=0}^{r-1} (n - |p - j|) \left(1 - \frac{(n - |p - i|)(n - |p - j|)}{n^2}\right)^2 f_{i,j}^2 + \\
&+ \sum_{i,j=0}^{r-1} |p - i| n \frac{(n - |p - i|)^2 (n - |p - j|)^2}{n^4} f_{i,j}^2 = \\
&= \sum_{i,j=0}^{r-1} f_{i,j}^2 \frac{(n - |p - i|)(n - |p - j|)(n(|p - i| + |p - j|) - |p - i||p - j|)}{n^2} \\
\frac{\sqrt{\sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C_{opt}))^2}}{\|T\|_F} &= \sqrt{\frac{\sum_{i,j=0}^{r-1} f_{i,j}^2 \frac{(n - |p - i|)(n - |p - j|)(n(|p - i| + |p - j|) - |p - i||p - j|)}{n^2}}{\sum_{i,j=0}^{r-1} (n - |p - i|)(n - |p - j|) f_{i,j}^2}} \leq \sqrt{\frac{r-1}{n}} \quad (7)
\end{aligned}$$

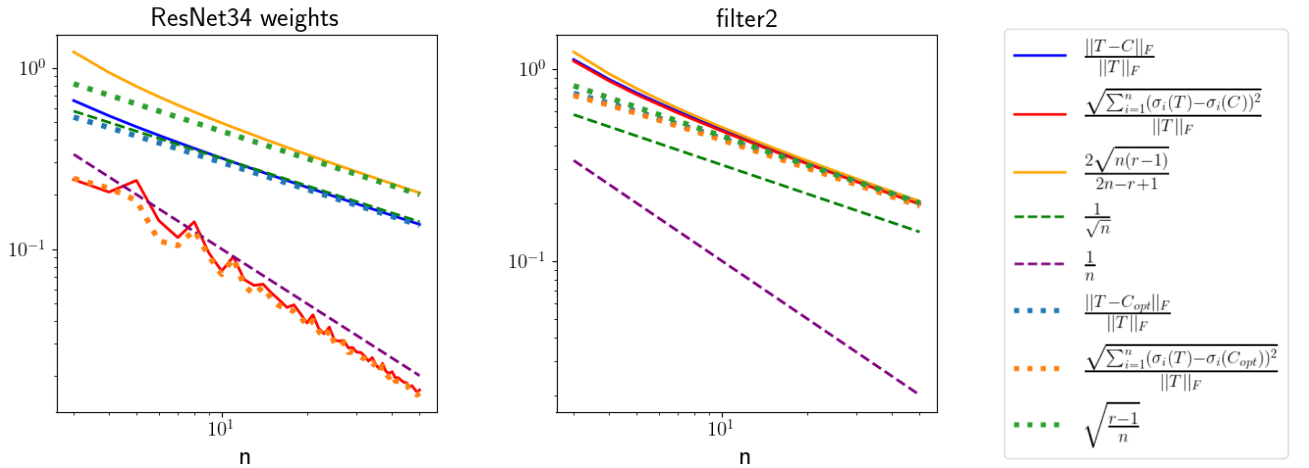


Рис. 3.4: График показывает асимптотику левой и правой части неравенства 6 и 7 в зависимости от n для одноканальной 2D свертки. На левом графике веса фильтра взяты из первого сверточного слоя предобученной ResNet34 из библиотеки torchvision. На правом графике веса фильтра равны $weights = [[1, 1, 100], [1, 1, 1], [1, 1, 1]]$. То есть асимптотика разности сингулярных чисел 2D свертки может быть как $O(\frac{1}{n})$, так и $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$. Видно, что оценка 6 может быть довольно близкой (красная и желтая линии на правом графике почти совпадают).

3.5 Многоканальная 2D свертка

Формула корреляции

$$Y_{alm} = \sum_{b=0}^c \sum_{i=0}^{r-1} \sum_{j=0}^{r-1} f_{abij} X_{l+i,m+j}$$

Формула периодической свертки

$$Y_{alm} = \sum_{b=0}^c \sum_{i=0}^{r-1} \sum_{j=0}^{r-1} f_{abij} X_{d,l-i(\bmod n),m-j(\bmod n)}$$

Пусть $F \in \mathbb{R}^{c \times c \times r \times r}$ - фильтр с одинаковым числом входных и выходных каналов, $X \in \mathbb{R}^{c \times n \times n}$ - входная матрица. Дополним X нулями до размера $c \times (n + r - 1) \times (n + r - 1)$ и применим корреляцию. (Обозначим размер паддинга $p = \lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor$). Получим результат $Y \in \mathbb{R}^{c \times n \times n}$, $vec(Y) = Tvec(X)$. Матрица преобразования $T \in \mathbb{R}^{cn^2 \times cn^2}$ - блочная матрица

$$T = \begin{bmatrix} T_{0,0} & T_{0,1} & \dots & T_{0,c-1} \\ T_{1,0} & T_{1,1} & \dots & T_{1,c-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{c-1,0} & T_{c-1,1} & \dots & T_{c-1,c-1} \end{bmatrix}, \quad (8)$$

где каждый из блоков $T_{a,b} \in \mathbb{R}^{n^2 \times n^2}$ - дважды теплицева матрица, по структуре аналогичная матрице T для 2D свертки 5 для соответствующих каналов а и б. Аналогично C - блочная матрица с дважды циркулянтными блоками, аналогичными матрице C для 2D свертки.

Запишем неравенство Виландта-Хоффмана

$$\begin{aligned} \sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C))^2 &\leq \|T - C\|_F^2 = \sum_{a=0}^{c-1} \sum_{b=0}^{c-1} \left(\sum_{i=0}^{r-1} (n - |p - i|) \sum_{j=0}^{r-1} |p - j| f_{i,j}^2 + \sum_{i=0}^{r-1} |p - i| \sum_{j=0}^{r-1} n f_{i,j}^2 \right) \\ &\leq 2np \|F\|^2 \end{aligned}$$

Поделив на $\|T\|_F$ и взяв корень, получим оценку, аналогичную 2D случаю

$$\frac{\sqrt{\sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C))^2}}{\|T\|_F} \leq \frac{\sqrt{2np} \|F\|_F}{(n - p) \|F\|_F} = \frac{2\sqrt{n(r-1)}}{2n - r + 1}. \quad (9)$$

Если C заменить на блочную матрицу из дважды оптимальных циркулянтов C_{opt} , то можно получить оценку

$$\frac{\sqrt{\sum_{t=1}^k (\sigma_t(T) - \sigma_t(C_{opt}))^2}}{\|T\|_F} \leq \sqrt{\frac{r-1}{n}}.$$

4 Сходимость проекций

4.1 Определения

Рассмотрим множество матриц размера $cn^2 \times cn^2$. Введем обозначения:

Определение 7. $\mathcal{B}_\beta = \{X \mid \|X\|_2 \leq \beta\}$ - множество матриц с ограниченной спектральной нормой.

Определение 8. $\mathcal{T}_{c,r}$ - множество матриц, соответствующих многоканальной свертке корреляции с фильтром размера $F \in \mathbb{R}^{c \times c \times r \times r}$ и суммарным нулевым паддингом $r - 1$ по краям (с одного края паддинг $p = \lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor$, с другого $r - 1 - p$). То есть $\mathcal{T}_{c,r}$ - это блочные матрицы, каждый блок которых - это дважды теплицева матрица (как в 8).

Определение 9. $\mathcal{C}_{c,r}$ - множество матриц, соответствующих многоканальной периодической свертке с фильтром размера $F \in \mathbb{R}^{c \times c \times r \times r}$, другими словами, это блочные матрицы, каждый блок которых - это дважды циркулянт.

4.2 Проекции

В этом разделе сформулируем некоторые вспомогательные теоремы.

Определение 10. Ортогональной проекцией матрицы Y на множество R называется

$$P_R(Y) = \arg \min_{X \in R} \|X - Y\|_F$$

Теорема 6. ([4] Proposition 1) Пусть матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, ее сингулярное разложение $A = UDV^t$. Пусть матрица $\tilde{A} = U\tilde{D}V^t$, где $\tilde{D}_{ii} = \min(D_{ii}, \beta)$ и $\mathcal{B}_\beta = \{X \mid \|X\|_2 \leq \beta\}$. Тогда \tilde{A} это проекция матрицы A на множество \mathcal{B}_β , то есть $\tilde{A} = \arg \min_{X \in \mathcal{B}_\beta} \|X - A\|_F$.

Теорема 7. Проекция из $\mathcal{T}_{c,r}$ на $\mathcal{C}_{c,r}$ это блочная матрица из оптимальных дважды циркулянтов.

Доказательство. Пусть $X \in \mathcal{T}_{c,r}$ и $Y \in \mathcal{C}_{c,r}$. Матрицы X и Y блочные, поэтому квадрат фробениусовой нормы их разности распадается на сумму квадратов норм разностей блоков.

$$\|X - Y\|_F^2 = \sum_{i,j=0}^{c-1} \|X_{i,j} - Y_{i,j}\|_F^2.$$

Чтобы найти Y , при которой достигается минимум $\|X - Y\|_F$, нужно минимизировать нормы $\|X_{i,j} - Y_{i,j}\|_F^2$. Каждую норму разности можно минимизировать отдельно, так как элементы

берутся из разных блоков фильтра. Из леммы 3 следует, что минимум достигается, когда $Y_{i,j}$ является оптимальным дважды циркулянтном для X_{ij} . \square

Лемма 4. Пусть $H \in \mathcal{T}_{1,n}$ - дважды теплицева матрица (то есть заполнены могут быть все диагонали, а не только r центральных). Тогда дважды теплицева матрица T с элементами ($p = \lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor$)

$$T_{ki} = \begin{cases} H_{ki}, & -p \leq k < p, -p \leq i < p \\ 0, & \text{иначе} \end{cases} \quad (10)$$

является проекцией H на множество $\mathcal{T}_{1,r}$ матриц с фильтром меньшего размера $r \leq n$, то есть

$$T = \arg \min_{X \in \mathcal{T}_{1,r}} \|H - X\|_F.$$

Доказательство. Запишем норму разности через элементы матриц

$$\|H - X\|_F^2 = \sum_{k=-n+1}^{n-1} (n-k) \|H_k - X_k\|_F^2 = \sum_{k=-n+1}^{n-1} \sum_{i=-n+1}^{n-1} (n-k)(n-i) (H_{ki} - X_{ki})^2$$

Видно, что минимум достигается при $X_{ki} = H_{ki}$ для ненулевых элементов матрицы X . \square

Теорема 8. Проекция блочной матрицы $H \in \mathcal{C}_{c,n}$ на множество $\mathcal{T}_{c,r}$ это блочная матрица из дважды теплицевых матриц T_{ki} , заданных по формуле 10.

Доказательство. Аналогично доказательству теоремы 7. Фробениусова норма разности распадается на сумму разностей блоков, каждый блок можно минимизировать отдельно. \square

Лемма 5. Проекция матрицы $Y \in \mathcal{C}_{c,n}$ с фильтром $F_Y \in \mathbb{R}^{c \times c \times n \times n}$ на множество $\mathcal{C}_{c,r}$ - это блочная матрица X из дважды циркулянтов с фильтром $F_X \in \mathbb{R}^{c \times c \times r \times r}$,

$$F_X = F_Y[:, :, q-p : q+r-1-p, q-p : q+r-1-p],$$

где $p = \lfloor \frac{r-1}{2} \rfloor, q = \lfloor \frac{n-1}{2} \rfloor$.

Доказательство. Аналогично доказательству теорем 4 и 7. Фробениусова норма разности распадается на сумму разностей блоков. Минимум разности блоков достигается, когда ненулевые элементы матрицы X совпадают с элементами матрицы Y на тех же позициях. \square

4.3 Сходимость итерационного процесса

Сформулируем два варианта итерационных процессов.

1) Пусть $Y_0 \in \mathcal{C}_{c,r}$. Будем циклически проектировать матрицу Y_0 на множества $\mathcal{C}_{c,r}$ и \mathcal{B} . То

есть построим последовательность матриц $Y_n \in \mathcal{C}_{c,r}$ так, что

$$Y_{n+1} = P_{\mathcal{C}_{c,r}}(P_{\mathcal{B}}(X_n)).$$

2) Пусть $X_0 \in \mathcal{T}_{c,r}$. Будем циклически проектировать матрицу X_0 на множества $\mathcal{T}_{c,r}, \mathcal{C}_{c,r}$ и \mathcal{B} . То есть построим последовательность матриц $X_n \in \mathcal{T}_{c,r}$ так, что

$$X_{n+1} = P_{\mathcal{T}_{c,r}}(P_{\mathcal{B}}(P_{\mathcal{C}_{c,r}}(X_n))).$$

Следующая теорема является основным результатом данной секции.

Теорема 9. 1) Последовательность матриц Y_n со скоростью геометрической прогрессии сходится к некоторой матрице $Y \in \mathcal{B} \cap \mathcal{C}_{c,r}$.

2) Последовательность матриц X_n со скоростью геометрической прогрессии сходится к некоторой матрице $X \in \mathcal{T}_{c,r} \cap \mathcal{C}_{c,r} \cap \mathcal{B}$.

Перед тем, как перейти к доказательству, сформулируем теорему.

Теорема 10. [2] Пусть E - гильбертово пространство. Пусть задана система множеств $Q_\alpha \in E, \alpha \in A$, где A - конечное или бесконечное множество индексов. Пусть выполняется последовательность проекций

$$x^{n+1} = P_{\alpha(n)}x^n. \quad (11)$$

Способ выбора $\alpha(n)$, может быть различным. Если A - конечномерное, то можно применять циклический порядок проектирования

$$\alpha(n) := \alpha_{n(\text{mod } m)+1}. \quad (12)$$

Пусть все множества Q_α замкнуты и выпуклы, $Q = \bigcap_{\alpha \in A} Q_\alpha$ непусто. Пусть выполнено любое из условий:

а) $Q_{\bar{\alpha}} \cap (\bigcap_{\alpha \in A, \alpha \neq \bar{\alpha}} Q_\alpha)^0$ непусто (здесь $Q_{\bar{\alpha}}$ - некоторое фиксированное множество из системы Q_α , R^0 означает внутренность R);

б) все Q_α , кроме, может быть, одного ($Q_{\bar{\alpha}}$), равномерно выпуклы *) с общей функцией $\delta(t)$;

в) E конечномерно

г) $A = \alpha_1, \dots, \alpha_m$ конечно, а все Q_α - полупространства, т. е. $Q_\alpha = \{x : (c_i, x) \leq \beta_i\}$.

Тогда в методах 11, 12 при любом x^0 последовательность x^n сильно сходится к некоторой точке $x^* \in Q = \bigcap_{\alpha \in A} Q_\alpha$. При этом если выполнены условия а) или г), то имеет место сходимостъ со скоростью геометрической прогрессии.

Определение 11. Множество Q называется выпуклым, если для любых двух точек $x, y \in Q$ и любого $\lambda \in [0, 1]$ точка $\lambda x + (1 - \lambda)y$ также принадлежит множеству Q .

Доказательство. 1) Пусть $E = \mathbb{R}^{cn^2 \times cn^2}$ гильбертово пространство квадратных матриц (скалярное произведение задается $(A, B) = tr(AB^*)$). Множество E конечномерное, поэтому выполнено условие в) теоремы 10.

2) Множества $\mathcal{T}_{c,r}, \mathcal{B}, \mathcal{C}_{c,r}$ - замкнутые и выпуклые.

Выпуклость \mathcal{B} : Пусть x и $y \in \mathcal{B}$. Тогда $\|\lambda x + (1 - \lambda)y\|_2 \leq \lambda \|x\|_2 + (1 - \lambda) \|y\|_2 \leq \lambda \beta + (1 - \lambda)\beta = \beta$, то есть $\lambda x + (1 - \lambda)y \in \mathcal{B}$.

Выпуклость $\mathcal{T}_{c,r}$ (для $\mathcal{C}_{c,r}$ аналогично): видно, что если x и $y \in \mathcal{T}_{c,r}$, то $(\lambda x + (1 - \lambda)y) \in \mathcal{T}_{c,r}$, так как размер фильтра не увеличился и на всех диагоналях остались равные элементы.

3) Пересечение множеств $\mathcal{T}_{c,r} \cap \mathcal{B} \cap \mathcal{C}_{c,r}$ непусто. Например, в пересечении множеств $\mathcal{T}_{c,r} \cap \mathcal{B} \cap \mathcal{C}_{c,r}$ лежат блочные матрицы с ограниченной спектральной нормой и с диагональными блоками, на диагоналях каждого блока одинаковые числа $\leq \beta$.

4) Для множеств $\mathcal{T}_{c,r}, \mathcal{B}, \mathcal{C}_{c,r}$ выполнено условие а) теоремы 10, то есть $Q_\alpha = \{\mathcal{T}_{c,r}, \mathcal{B}, \mathcal{C}_{c,r}\}$, и выполнено $Q_{\bar{\alpha}} \cap \left(\bigcap_{\alpha \in A, \alpha \neq \bar{\alpha}} Q_\alpha \right)^0$ непусто. Например, в любом из пересечений $\mathcal{B} \cap (\mathcal{T}_{c,r} \cap \mathcal{C}_{c,r})^0$, $\mathcal{T}_{c,r} \cap (\mathcal{B} \cap \mathcal{C}_{c,r})^0$, $\mathcal{C}_{c,r} \cap (\mathcal{T}_{c,r} \cap \mathcal{B})^0$ лежит диагональная матрица $D \in \mathbb{R}^{cn^2 \times cn^2}$ с равными элементами $< \beta$ на диагонали.

Так как выполнены условия а) и в) теоремы 10, то последовательность матриц X_n сильно сходится к некоторой матрице $X \in \mathcal{T}_{c,r} \cap \mathcal{C}_{c,r} \cap \mathcal{B}$, последовательность матриц Y_n сильно сходится к $Y \in \mathcal{C}_{c,r} \cap \mathcal{B}$, и в обоих случаях имеет место сходимость со скоростью геометрической прогрессии. \square

4.4 Выводы

В статье [6] было предложено ограничивать сингулярные числа периодической свертки с помощью следующего алгоритма: проектировать многоканальный дважды циркулянт на множество матриц с ограниченной второй нормой (при этом получается циркулянт с бóльшим фильтром, чем исходный), потом обрезать фильтр полученного циркулянта до исходного размера. (Замечу, что в данном алгоритме задействуется только фильтр). Первый метод проектирования в теореме 9 - это в точности метод, предложенный в статье [6]. Такой итерационный процесс сходится для периодической свертки, и в результате получается матрица с ограниченными сингулярными числами. Если применять данный метод к фильтру свертки-корреляции, то он все так же будет сходиться. При этом так как сингулярные числа периодической свертки и корреляции близки (было показано в предыдущем разделе), то

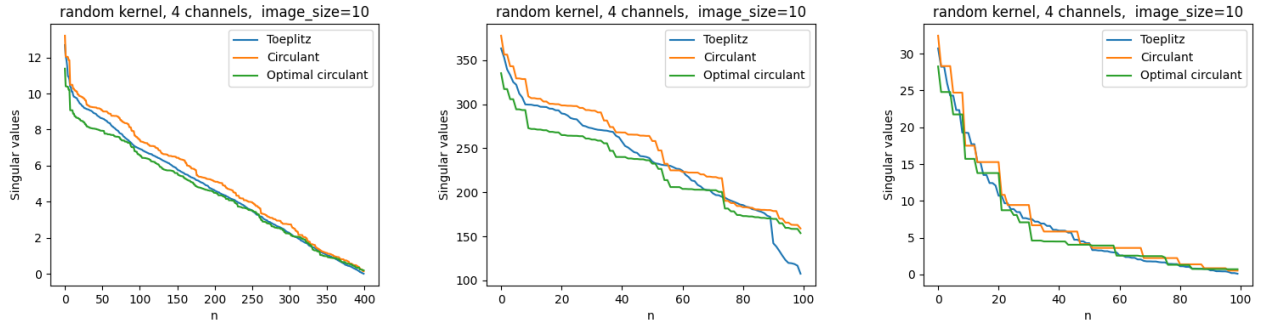


Рис. 4.1: На графиках изображены сингулярные числа для многоканального дважды циркулянта с 4 каналами, дважды теплицевой матрицы и оптимального дважды циркулянта размера $\mathbb{R}^{4(10)^2 \times 4(10)^2}$. Заметно, что сингулярные числа у оптимального циркулянта ближе к теплицевой матрице, чем у "обычного" циркулянта. Старшее сингулярное число "обычного" циркулянта может лучше приближать старшее число теплицевой матрицы. Наименьшие сингулярные числа циркулянтов и матриц Теплица могут сильно отличаться.

в результате применения алгоритма будет получена матрица корреляции с ограниченными сингулярными числами.

При применении второго метода из теоремы 9 итерационный процесс сходится к тривиальной матрице (блочной-диагональной с ограниченной спектральной нормой). Поэтому данный метод плохо работает для ограничения спектральной нормы нейросети. Однако проекцию дважды теплицевой матрицы на оптимальный циркулянт можно использовать для оценки ее сингулярных чисел, так как сингулярные числа оптимального циркулянта и теплицевой матрицы ближе, чем для "обычного" циркулянта (рис. 4.1).

5 Заключение

В данной работе были получены оценки сингулярных чисел свертки-корреляции. Оценки показывают, что сингулярные числа корреляции и периодической свертки асимптотически близки, однако при маленьком размере входного изображения периодическая свертка дает не самое хорошее приближение. С помощью оптимального циркулянта получена лучшая оценка в неравенстве Виландта-Хоффмана, и заметно, что оценка с помощью "обычного" циркулянта очень близка к оптимальной (например, для двумерной свертки $\frac{2\sqrt{n(r-1)}}{2n-r+1}$ близка к оптимальной $\sqrt{\frac{r-1}{n}}$). Полученные с помощью неравенства Виландта-Хоффмана оценки имеют асимптотику $O(\frac{1}{\sqrt{n}})$, хотя на практике асимптотика может быть и лучше (для некоторых фильтров $O(\frac{1}{n})$).

Был проанализирован метод, предложенный в статье [6]. При его итеративном применении во время обучения нейросети получается ограничить сингулярные числа свертки-

корреляции, так как сингулярные числа периодической свертки и корреляции достаточно близки. Другой способ ограничения сингулярных чисел с помощью проектирования на оптимальный циркулянт оказался неэффективным.

Список литературы

- [1] Tony F Chan. “An optimal circulant preconditioner for Toeplitz systems”. В: *SIAM journal on scientific and statistical computing* 9.4 (1988), с. 766—771.
- [2] Leonid Georgievich Gurin, Boris Teodorovich Polyak и È V Raik. “The method of projections for finding the common point of convex sets”. В: *Zhurnal Vychislitel'noi Matematiki i Matematicheskoi Fiziki* 7.6 (1967), с. 1211—1228.
- [3] Caleb Ju и Edgar Solomonik. “Derivation and analysis of fast bilinear algorithms for convolution”. В: *SIAM Review* 62.4 (2020), с. 743—777.
- [4] Stamatios Lefkimmiatis, John Paul Ward и Michael Unser. “Hessian Schatten-norm regularization for linear inverse problems”. В: *IEEE transactions on image processing* 22.5 (2013), с. 1873—1888.
- [5] Behnam Neyshabur, Srinadh Bhojanapalli и Nathan Srebro. “A pac-bayesian approach to spectrally-normalized margin bounds for neural networks”. В: *arXiv preprint arXiv:1707.09564* (2017).
- [6] Hanie Sedghi, Vineet Gupta и Philip M Long. “The singular values of convolutional layers”. В: *arXiv preprint arXiv:1805.10408* (2018).
- [7] Sahil Singla и Soheil Feizi. “Fantastic four: Differentiable bounds on singular values of convolution layers”. В: *arXiv preprint arXiv:1911.10258* (2019).
- [8] Lechao Xiao, Yasaman Bahri, Jascha Sohl-Dickstein, Samuel Schoenholz и Jeffrey Pennington. “Dynamical isometry and a mean field theory of cnns: How to train 10,000-layer vanilla convolutional neural networks”. В: *International Conference on Machine Learning*. PMLR, 2018, с. 5393—5402.
- [9] Xinping Yi. “Asymptotic Singular Value Distribution of Linear Convolutional Layers”. В: (июнь 2020).
- [10] Yuichi Yoshida и Takeru Miyato. “Spectral norm regularization for improving the generalizability of deep learning”. В: *arXiv preprint arXiv:1705.10941* (2017).
- [11] Wen-Chyuan Yueh. “Eigenvalues of several tridiagonal matrices.” В: *Applied Mathematics E-Notes [electronic only]* 5 (2005), с. 66—74.