発表番号：27

第24回情報論的学習理論ワークショップ(IBIS2021)
2021/11/10〜13

# Eigenvectors of Fisher Information Matrix for Simple ReLU Networks

***Abstract***

In learning neural network parameters, it is important to examine the Fisher information matrix (FIM). We investigate the FIM of a one hidden layer network with the ReLU activation function and identify the main eigenvalues and eigenvectors of the FIM under certain conditions.

武石　啓成，飯田　昌澄，竹内　純一 (九州大学)

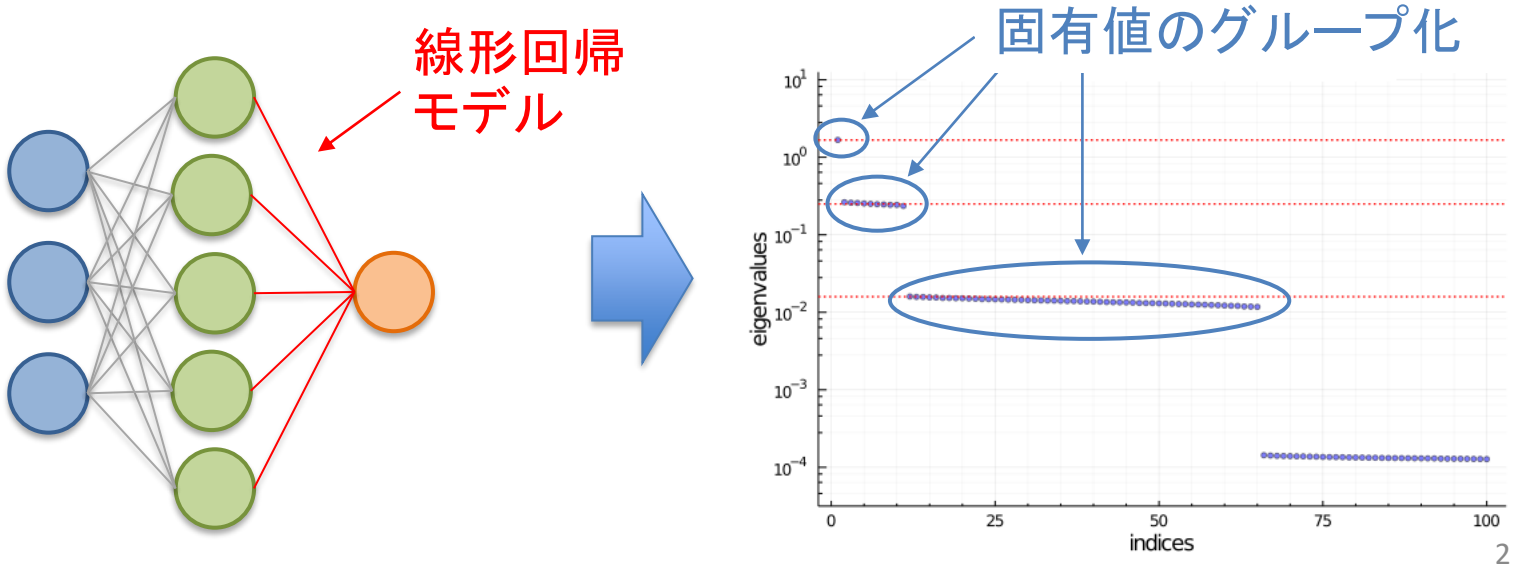
有益な助言を頂いた長岡浩司氏，村田昇氏，三村和史氏に謝意を表する

# 研究背景・概要

- 深層学習→理論的性能評価が課題（汎化誤差の評価）
- 汎化誤差の解析→Fisher情報行列が重要な役割

## 研究成果

簡単なReLUニューラルネットワークにおいて，Fisher情報行列の主要な固有値と固有ベクトルを特定



# 問題設定

ベクトルは特に断りがない限り，行ベクトルで定義する

- 隠れ層1層のニューラルネットワーク
（バイアス項無し）

入力層　隠れ層　出力層

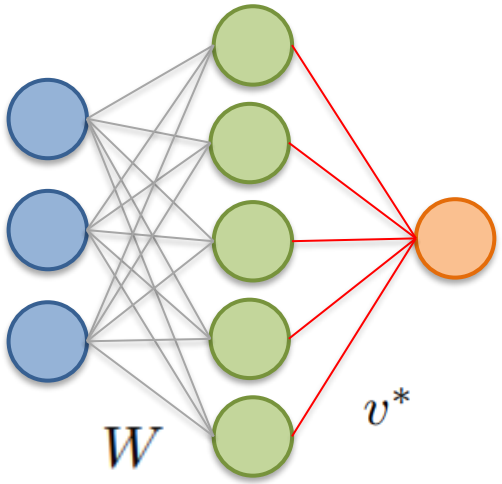
$x \in \Re^d$　$X \in \Re^p$　$y \in \Re$

- 隠れ層の$j$番目の出力

$$X_j = \varphi\left(\sum_{i=1}^{d} x_i W_{ij}\right) \quad \text{for } j = 1,2,\ldots,p$$

$$\varphi(z) = \begin{cases} z & \text{if } z \geq 0 \\ 0 & \text{if } z < 0 \end{cases} \quad \text{(ReLU)}$$

$W \in \Re^{d \times p}$　(重み行列 $p >> d$ )




- 出力層

$$y = Xv^{*T} + \epsilon \qquad v^* \in \Re^p \qquad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

目標

学習データ $\{x_{(1)}, y_{(1)}\}, \ldots, \{x_{(n)}, y_{(n)}\}$ から $v^*$ を推定したい

# 汎化誤差

- $v^*$ の推定結果を $v$ とすると，汎化誤差は

$$\begin{aligned} E[(y - Xv^T)^2] &= E[(X(v^* - v)^T + \epsilon)^2] \\ &= (v - v^*)J(v - v^*)^T + \sigma^2 \end{aligned}$$

  - 期待値は $x$ と $\epsilon$ に対して取る ( $x \sim N(0, I_d)$ )
  - $J = E[X^T X]$

- $J$ の主要な固有ベクトルの方向に対して，パラメータ $v$ の学習を進める必要あり
- $J$ はFisher情報行列 $I$ の定数倍

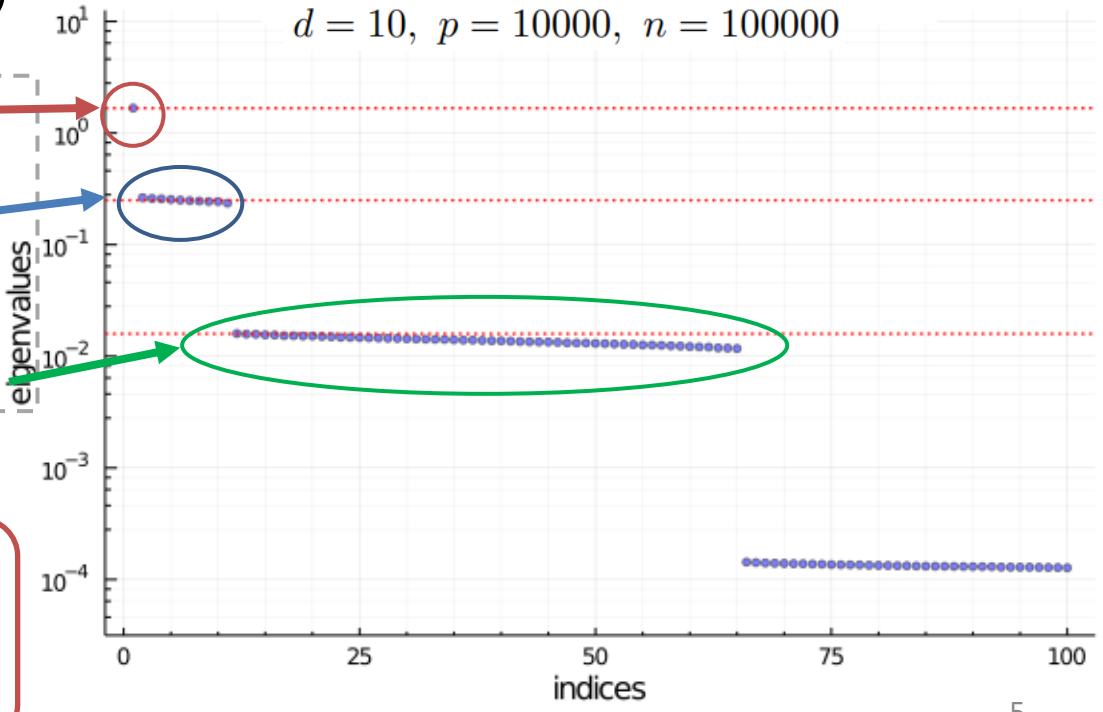
$$I_{ij} = E\left[\frac{\partial}{\partial v_i} \log p(x, y|v) \frac{\partial}{\partial v_j} \log p(x, y|v)\right] = \frac{J_{ij}}{\sigma^2}$$

# $J$ の固有値分布

- $J^{(n)} = \frac{1}{n}\sum_{t=1}^{n} {X_{(t)}}^T X_{(t)}$（ $J = E[X^T X]$ の近似）
- 数値シミュレーションにより，$J^{(n)}$ の固有値を計算

（$W_{ij} \sim N(0, 1/p)$で生成）

1. 最大固有値
2. $d$ 個の固有値
3. $d(d+1)/2 - 1$ 個の固有値




**本研究の動機**

各グループの固有ベクトルを特定し，定式化したい

# 各ベクトルの定義

2.

- $W_l \in \Re^p$ : 行列$W$ の$l$ 番目の行ベクトル
- $W^{(i)} \in \Re^d$ :行列$W$ の$i$ 番目の列ベクトル

1.

- $v^{(0)} \in \Re^p$ : $i$ 番目の要素が以下で定義される行ベクトル

$$v_i^{(0)} = \frac{\|W^{(i)}\|}{\sqrt{d}}$$ ( $W_{ij} \sim N(0, 1/p)$ のとき $v^{(0)}$ は $\frac{1}{\sqrt{p}}(1, \ldots, 1)$ に近い)

3.

- $v^{(\alpha,\beta)} \in \Re^p$ : $i$ 番目の要素が以下で定義される行ベクトル

$$v_i^{(\alpha,\beta)} = \frac{\sqrt{d} W_{\alpha i} W_{\beta i}}{\|W^{(i)}\|} \quad (1 \le \alpha \le \beta \le d)$$

- $v^{(\gamma)} \in \Re^p$ : $v^{(\gamma)} = \frac{v^{(\gamma,\gamma)} - v^{(0)}}{\sqrt{2}} \quad (1 \le \gamma \le d)$ $\quad (\sum_{\gamma=1}^{d} v^{(\gamma)} = 0)$

  - $\sum_{\gamma=1}^{d} v_i^{(\gamma,\gamma)} = \sum_{\gamma=1}^{d} \frac{\sqrt{d} W_{\gamma i}^2}{\|W^{(i)}\|} = \frac{\sqrt{d}\|W^{(i)}\|^2}{\|W^{(i)}\|} = d v_i^{(0)}$ より, $v^{(0)}$ は $v^{(\gamma,\gamma)}$ の重心

# 行列 $J$ の各要素の計算

## 補題1

$\theta_{ij} = \angle(W^{(i)}, W^{(j)}) \in [0, \pi]$ とすると，$i \neq j$ のとき以下が成り立つ

$$J_{ij} = \frac{1}{2\pi}((\pi - \theta_{ij})\cos\theta_{ij} + \sin\theta_{ij})\|W^{(i)}\|\|W^{(j)}\|$$

対角成分は，上式で $\theta_{ii} = 0$ とすると以下となる

$$J_{ii} = \frac{1}{2}\|W^{(i)}\|^2$$

導出

## 定理1 (Tian 2017)

行ベクトル $e, w, x \in \Re^d$ ( $e$ は単位ベクトル)と，

$D(w) = \begin{cases} 1 & \text{if } x \cdot w > 0 \\ 0 & \text{if } x \cdot w \leq 0 \end{cases}$ に対して，$F(e, w) = x^T D(e) D(w) x \cdot w$を定義する

$x \sim N(0, I_d)$ としたとき，$\theta = \angle(e, w) \in [0, \pi]$ に対して，以下が成り立つ

$$E[F(e, w)] = \frac{1}{2\pi}[(\pi - \theta)w^T + (\|w\|\sin\theta)e^T]$$

$e = W^{(i)T}/\|W^{(i)}\|$
$w = W^{(j)T}$ を代入

# 行列 $J$ の固有値分解

補題1

$$J_{ij} = \frac{1}{2\pi}((\pi - \theta_{ij})\cos\theta_{ij} + \sin\theta_{ij})A_{ij} \qquad A_{ij} = \|W^{(i)}\|\|W^{(j)}\|$$

$$\cos\theta_{ij} = W^{(i)}\cdot W^{(j)}/A_{ij}$$

$$\arcsin z = \sum_{n=0}^{\infty}\binom{2n}{n}\frac{z^{2n+1}}{2^{2n}(2n+1)}$$

$$J_{ij} = \frac{A_{ij}}{2\pi} + \frac{W^{(i)}\cdot W^{(j)}}{4} + \frac{(W^{(i)}\cdot W^{(j)})^2}{4\pi A_{ij}} + \frac{1}{2\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\binom{2n}{n}\frac{(W^{(i)}\cdot W^{(j)})^{2n+2}}{2^{2n}(2n+1)(2n+2)A_{ij}^{2n+1}}$$

$$A_{ij} = \|W^{(i)}\|\|W^{(j)}\| = d\left(v^{(0)T}v^{(0)}\right)_{ij}$$

$$W^{(i)}\cdot W^{(j)} = \sum_{l=1}^{d} W_{l,i}W_{l,j} = \sum_{k=1}^{d}(W_l^T W_l)_{ij} \quad \text{etc.}$$

定理2

$$J = \underbrace{\frac{2d+1}{4\pi}v^{(0)T}v^{(0)}}_{1.} + \underbrace{\frac{1}{4}\sum_{k=1}^{d}W_k^T W_k}_{2.} + \underbrace{\frac{1}{2\pi d}\left(\sum_{\gamma=1}^{d}v^{(\gamma)T}v^{(\gamma)} + \sum_{\alpha<\beta}v^{(\alpha,\beta)T}v^{(\alpha,\beta)}\right)}_{3.} + \underbrace{R}_{\text{半正定値}}$$

# 正規直交性の評価

## 補題2

$W_{ij} \sim N(0, 1/p)$とし，$D = (d+1)(d+2)(d^2+3d+4)/8$とする．
このとき，任意の正数 $\delta$ に対して，確率 $1 - CD/(\delta^2 p)$以上で下記が成立

(1)
$$
\begin{aligned}
|\|v^{(0)}\|^2 - 1| &\leq \delta, \\
|\|W_l\|^2 - 1| &\leq \delta, && (1 \leq l \leq d) \\
|\|v^{(\alpha,\beta)}\|^2 - 1| &\leq \delta + \xi(d_1), && (1 \leq \alpha < \beta \leq d) \\
|\|v^{(\gamma)}\|^2 - 1| &\leq \delta + \xi(d_2). && (1 \leq \gamma \leq d)
\end{aligned}
$$
(正規性)

(2) $V_1 = \{v^{(0)}, W_l, v^{(\alpha,\beta)} | 1 \leq l \leq d, 1 \leq \alpha < \beta \leq d\}$
$V_2 = \{v^{(\gamma)} | 1 \leq \gamma \leq d\}$，$V = V_1 \cup V_2$ とすると，相異なるベクトル $v, v' \in V$ について，以下が成り立つ

$$
\begin{aligned}
|v \cdot v'| &\leq \delta && (v \notin V_2 \text{ or } v' \notin V_2) \\
\left| v \cdot v' - \left( -\frac{1}{d-1} \right) \right| &\leq \delta + \frac{\xi(d_2)}{d-1} && (v, v' \in V_2)
\end{aligned}
$$
(直交性)

( $d_1 = d-2$, $d_2 = d-1$. $\xi(d)$は任意の $\eta \in (0, 1/2)$について，$O\left(1/d^{1/2-\eta}\right)$)

# $W$ に関する確率的評価

## 定理3

$W_{ij} \sim N(0, 1/p)$ とし，$D = (d+1)(d+2)(d^2+3d+4)/8$ とする．
このとき，任意の正数 $\delta$ に対して，確率 $1 - CD/(\delta^2 p)$ 以上で下記が成立

(1) $\mathrm{tr}(J) \leq \dfrac{d}{2}(1+\delta)$ （固有値和の上界）

(2)

$$\frac{v^{(0)}}{\|v^{(0)}\|} J \frac{v^{(0)T}}{\|v^{(0)}\|} \geq \frac{2d+1}{4\pi}(1-\delta)$$

(1. 方向の固有値の下界)

$$\frac{W_l}{\|W_l\|} J \frac{W_l^T}{\|W_l\|} \geq \frac{1}{4}(1-\delta)$$

(2. 方向の固有値の下界)

$$\frac{v^{(\alpha,\beta)}}{\|v^{(\alpha,\beta)}\|} J \frac{v^{(\alpha,\beta)T}}{\|v^{(\alpha,\beta)}\|} \geq \frac{1}{2\pi d}(1-\delta-\xi(d_1))$$

$$\frac{v^{(\gamma)}}{\|v^{(\gamma)}\|} J \frac{v^{(\gamma)T}}{\|v^{(\gamma)}\|} \geq \frac{1}{2\pi d}(1-\delta-\xi(d_2))$$

(3. 方向の固有値の下界)

( $d_1 = d-2$, $d_2 = d-1$. $\xi(d)$ は任意の $\eta \in (0, 1/2)$ について，$O\left(1/d^{1/2-\eta}\right)$ )

$$\frac{2d+1}{4\pi} + \frac{1}{4} \cdot d + \frac{1}{2\pi d} \cdot \left( \frac{d(d-1)}{2} + d - 1 \right) \simeq 0.977 \cdot \frac{d}{2}$$

# 数値シミュレーション

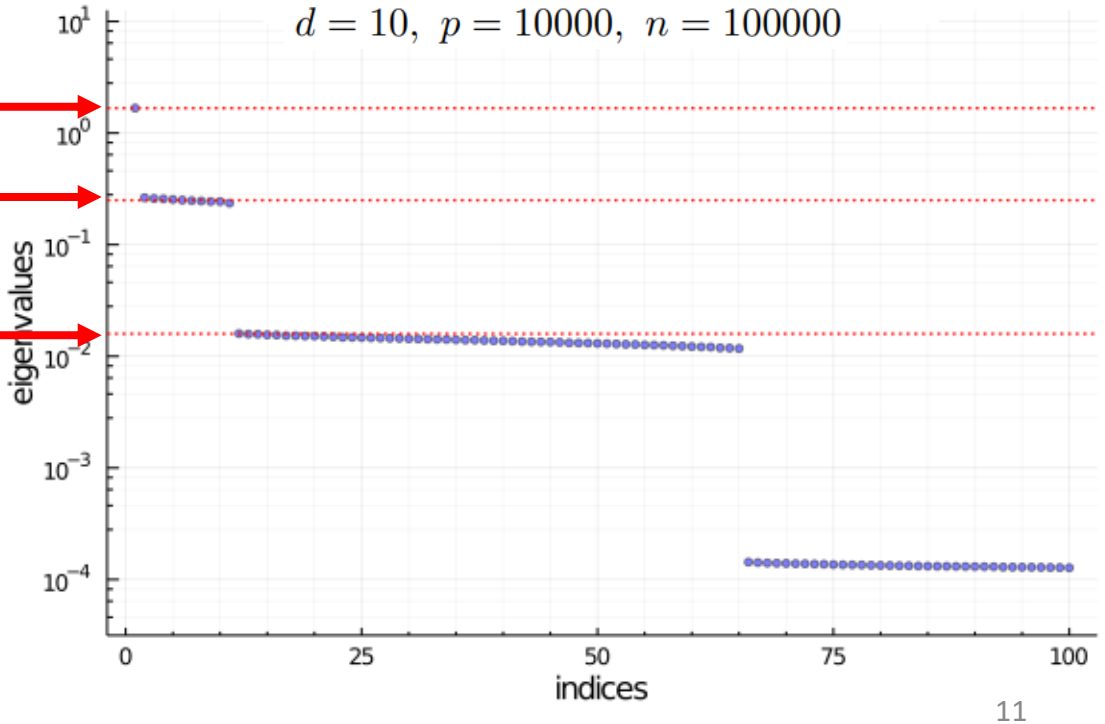
- 定理3による固有値の下界の見積もり値を，数値シミュレーション結果と比較

$$\frac{v^{(0)}}{\|v^{(0)}\|} J \frac{v^{(0)T}}{\|v^{(0)}\|} \geq \frac{2d+1}{4\pi}(1-\delta)$$

$$\frac{W_l}{\|W_l\|} J \frac{W_l^T}{\|W_l\|} \geq \frac{1}{4}(1-\delta)$$

$$\frac{v^{(\alpha,\beta)}}{\|v^{(\alpha,\beta)}\|} J \frac{v^{(\alpha,\beta)T}}{\|v^{(\alpha,\beta)}\|} \geq \frac{1}{2\pi d}(1-\delta-\xi(d_1))$$

$$\frac{v^{(\gamma)}}{\|v^{(\gamma)}\|} J \frac{v^{(\gamma)T}}{\|v^{(\gamma)}\|} \geq \frac{1}{2\pi d}(1-\delta-\xi(d_2))$$



# まとめ

- 簡単なReLUニューラルネットワークにおいて，Fisher情報行列の主要な固有値と固有ベクトルを特定
  - 固有値の大きさの「グループ化」

今後の展望

- 多層のニューラルネットワークや、ReLU以外の活性化関数への拡張
- 汎化誤差の評価に本研究の成果を活用

# 参考文献 (1/2)


[1] S. Amari, “Any Target Function Exists in a Neighborhood of Any Sufficiently Wide Random Network: A Geometrical Perspective,” *Neural Computation* 32, pp.1431-1447, 2020

[2] R. Bapat, *Nonnegative Matrices and Applications*, Cambridge University Press, 1997

[3] A. R. Barron and T. M. Cover, “Minimum complexity density estimation,” *IEEE Trans. Inf. Theory*, vol. 37, no. 4, pp. 1034-1054, Jul. 1991.

[4] M. Belkin, D. Hsu, S. Ma, and S. Mandal, “Reconciling modern machine learning practice and the bias-variance trade-off,” *In Proc. of the National Academy of Sciences*, 116.32, pp. 15849-15854, 2019.

[5] M. Belkin, D. Hsu, and J. Xu, “Two models of double descent for weak feature,” *SIAM Journal on Mathematics of Data Science*, 2(4):1167-1180, 2020.

[6] I. S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series, and Products*, fourth edition, Academic Press, 1980

[7] A. Jacot, F. Gabriel, and C. Hongler, “Neural tangent kernel: Convergence and generalization in neural networks,” Presented at the 32nd Conference on Neural Information Processing Systems, arXiv:1806.07572v3, 2018.

# 参考文献 (2/2)

[8] R. Karakida, S. Akaho, and S. Amari, “Universal Statistics of Fisher Information in Deep Neural Networks: Mean Field Approach,” Presented at the 22nd International Conference on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS), arXiv:1806.01316, 2019.

[9] M. Kawakita and J. Takeuchi, “Minimum Description Length Principle in Supervised Learning with Application to Lasso,” *IEEE Trans. Inf. Theory*, vol. 66, no. 7, pp. 4245-4269, Jul. 2020.

[10] Y. LeCun, L. Bottou, G. B. Orr, and K. Muller, “Efficient backprop,” In *Neural networks: Tricks of the trade*, pp. 9-50. Springer, 1998.

[11] J. Rissanen, “Modeling by shortest data description,” *Automatica*, vol. 14, no. 5, pp. 465-471, Sep. 1978.

[12] Y. Tian, “An analytical formula of population gradient for two-layered ReLU network and its applications in convergence and critical point analysis,” in *Proc. International Conference on Machine Learning*, pp. 3404-3413, 2017.

[13] M. J. Wainwright, *High-Dimensional Statistics*, Cambridge University Press, 2019