信息矩阵: \$ ds^2 = D_{KL} \left(P(y|x; \theta) \parallel P(y|x; \theta+\delta) \right) \approx \frac{1}{2} \delta^\top F(\theta) \delta, \tag{8} \\$\$ F(\theta) = \mathbb{E} \left[\frac{\partial \log P(y|x; \theta)}{\partial \theta} \frac{\partial \log P(y|x; \theta)^\top}{\partial \theta} \right], \tag{9} \\$\$ x \sim P(x), y \sim P(y|x) \\$\$

其中,\$\delta\$ 表示参数的微小变化。上述黎曼度量为参数空间提供了一种几何视角。通过对黎曼度量的分析,我们可以深入理解归一化方法如何有助于神经网络的训练。

5.2.2 归一化广义线性模型的几何性质 我们将几何分析的重点放在广义线性模型 (Generalized Linear Model, GLM) 上。以下分析结果可以轻松推广到具有块对角近似Fishe r信息矩阵的深度神经网络,其中每个块对应于单个神经元的参数。

广义线性模型可以看作是通过权重向量 \$w\$ 和偏置标量 \$b\$ 对指数族输出分布进行参数化。为与前文保持一致,GLM的对数似然可以用求和输入 \$a\$ 表示如下: \$\$ \log P(y|x; w, b) = \frac{(a + b)y - \eta(a + b)}{\phi} + c(y, \phi), \tag{10} \$\$\$ \mathbb{E}[y|x] = f(a + b) = f(w^\top x + b), \quad \text{Var}[y|x] = \phi f'(a + b), \tag{11} \$\$\$

其中,\$f(\cdot)\$ 是传递函数(类比神经网络中的非线性激活函数),\$f'(\cdot)\$是传递函数的导数,\$\eta(\cdot)\$是实值函数,\$c(\cdot)\$是对数配分函数。\$\phi\$是缩放输出方差的常数。假设使用 \$H\$ 个独立的GLM对 \$H\$ 维输出向量 \$y = [y_1, y_2, \cdots, y_H]\$建模,且 \$\log P(y|x; W, b) = \sum_{i=1}^H \log P(y_i|x; w_i, b_i)\$。令 \$W\$ 为权重矩阵(其行向量为各GLM的权重向量),\$b\$ 为长度为 \$H\$的偏置向量,\$\text{vec}(\cdot)\$ 表示Kronecker向量化算子。多维GLM关于其参数 \$\theta = [w_1^\top, b_1, \cdots, w_H^\top, b_H]^\top = \text{vec}([W, b]^\top)\$的Fisher信息矩阵即为数据特征与输出协方差矩阵的期望Kronecker积: \$\$F(\theta) = \mathbb{E}_{x}\sim P(x)}\left[\frac{\text{Cov}[y|x]}{\phi^2}\otimes \begin{bmatrix} xx^\top & x \\ x^\top & 1 \end{bmatrix} \right]. \tag{12} \$\$

诵讨均值 \$\mu\$ \$\sigma\$ \$a\$ 和标准差 对原始模型的求和输入 应用归一化方法,我们得到归一化的GLM。不失一般性,我们用 $\alpha F}$ q]^\top)\$ 表示带有额外增益参数 \$\theta = \text{vec}([W, b, 的归一化多维GLM的Fisher信息矩阵: \$\$ \bar{F}(\theta) \begin{bmatrix} = \bar{F} {11} & \cdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \$\$

我们将归一化多维GLM (Generalized Linear Model, 广义线性模型) 中带有额外增益参数\$\theta = \text{vec}([W,b,g]^\top)\$的Fisher信息矩阵记为\$\bar{F}\$:

\$\$ \bar{F}(\theta) = \begin{bmatrix} \bar{F}_{11} & \cdots & \bar{F}_{1H} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{F}_{H1} & \cdots & \bar{F}_{1H} \\ \end{bmatrix}, \quad \bar{F}_{ij} = \mathbb{E}_{x \sim P(x)} \begin{bmatrix} \text{Cov}\left[\frac{y_i}{\phi}, \frac{y_j}{\phi} \Big| x\right] \begin{bmatrix} \frac{\sigma_j}{g_i g_j} \chi_i \chi_j^\top & \frac{\chi_j}{g_i \sigma_j} \\ \frac{\chi_i^\top}{g_j \sigma_j} \\ \frac{\chi_i^\top}{g_j \sigma_j} - \frac{\mu_j}{\sigma_j} \\ \frac{\chi_j^\top (a_i - \mu_j)}{\sigma_j} \\ \frac{a_i - \mu_j}{\sigma_j} \\ \frac{a_j - \mu_j}

其中: $\$ \chi_i = x - \frac{\pi_i \ mu_i}{\pi_i} - \frac{a_i - \mu_i}{\sin_i} \frac{\pi_i \ mu_i}{\pi_i} \ frac{\pi_i - \mu_i}{\pi_i} \ frac{\pi_i}{\pi_i} \ frac{\pi_i - \mu_i}{\pi_i} \ frac{\pi_i}{\pi_i} \ frac{\pi_

通过权重向量增长实现的隐式学习率衰减:值得注意的是,与标准 GLM相比,沿权重向量\$w_i\$方向的块矩阵\$\bar{F}_{ij}\$会受到增益参数和归一化标量\$\sigma_i\$的缩放影响。若权重向量\$w_i\$的范数增长为原来的两倍,即使模型输出保持不变,Fisher信息矩阵也会发生变化。沿\$w_i\$方向的曲率将因\$\sigma_i\$同样变为两倍而改变为原来的\$1/2\$。因此,在归一化模型中,对于相同的参数更新,权重向量的范数实际上控制着该向量的学习率。在学习过程中,具有较大范数的权重向量更难改变其方向。由此可见,归一化方法.....

42 41 38 37 36 35 34 0 50 100 150 200 250 300 迭代次数 x 300 1@召回率 名称 图像检索(验证集) 顺序嵌入+层归一化 72 顺序嵌入 71 0 50 100 150 200 250 300 迭代次数 x 300 (a) 召回率@1 5@召回率 名称 图像检索(验证集) 顺序嵌入+层归一化 85 顺序嵌入 84 0 50 100 150 200 250 300 迭代次数 x 300 (b) 召回率@5 10@召回率 名称 图像检索(验证集) 顺序嵌入+层归一化 顺序嵌入 (c) 召回率@10 图1:使用层归一化与未使用层归一化的顺序嵌入模型的召回率@K曲线对比。

MSCOCO数据集 标题检索 图像检索 模型 R@1 R@5 R@10 平均秩 R@1 R@5 R@10 平均秩 对称基线[Vendrov等, 2016] 45.4 88.7 5.8 36.3 85.8 9.0 顺序嵌入[Vendrov等, 2016] 46.7 88.9 5.7 37.9 85.9 8.1 顺序嵌入(本实验) 46.6 79.3 89.1 5.2 37.8 73.6 85.7 7.9 顺序嵌入+层归一化 48.5 80.6 89.8 5.1 38.9 74.3 86.3 7.6 表2: 标题和图像检索在5个测试集上的平均结果。R@K表示召回率@K(数值越高越好),平均秩表示平均排名(数值越低越好)。对称基线对应对称基准模型,顺序嵌入表示顺序嵌入模型。

对权重向量具有隐式的"早停"效应,有助于稳定学习过程直至收敛。

学习输入权重的幅度:在归一化模型中,输入权重的幅度通过增益参数显式参数化。我们比较了在归一化GLM中更新增益参数与在学习过程中更新原始参数化下等效权重幅度的模型输出变化。\$\bar{F}\$中沿增益参数的方向捕获了输入权重幅度的几何特性。我们证明标准GLM沿输入权重幅度的黎曼度量由其输入范数缩放,而批量归一化和层归一化模型对增

益参数的学习仅取决于预测误差的幅度。因此,归一化模型中对输入权重的幅度学习相比标准模型对输入及其参数的缩放更具鲁棒性。详见附录中的详细推导。

6 实验结果 我们在6个任务上进行了层归一化实验,重点关注循环神经网络:图像-句子排序、问答、上下文语言建模、生成建模、手写序列生成和MNIST分类。除非另有说明,实验中层归一化的默认初始化设置是将自适应增益设为1,偏置设为0。

6.1 图像与语言的序嵌入(Order Embeddings)

在本实验中,我们将层归一化(Layer Normalization)应用于Vendrov等人[2016]最近提出的序嵌入模型,该模型用于学习图像与句子的联合嵌入空间。我们遵循与Vendrov等人[2016]相同的实验方案,并修改了他们公开可用的代码以加入层归一化。该代码基于Theano框架[Team等人,2016]。来自Microsoft COCO数据集[Lin等人,2014]的图像和句子被嵌入到一个共同的向量空间中,其中使用GRU[Cho等人,2014]对句子进行编码,使用预训练VGG卷积网络[Simonyan和Zisserman,2015](10-crop)的输出对图像进行编码。序嵌入模型将图像和句子表示为2级偏序关系,并用非对称评分函数取代了Kiros等人[2014]中使用的余弦相似度评分函数。