

Rapport - Double Descente

Emett Haddad, Encadrants: Nicolas Vayatis, Samuel Gruffaz

24/06/2024

Plan

1	Introduction	2
2	Présentation du problème	2
3	Régimes et Double Descente	3
4	Modèles	4
4.1	Modèle par MLP: (Multilayer Perceptron)	4
4.2	Modèles linéaires	4
4.3	Modèle linéaire pénalisé (Ridge Regression)	4
5	Etat de l’art	5
6	Focus techniques	5
6.1	Théorèmes de Belkin et al.	5
6.2	Théorème de Kuzborskij et al.	6
6.3	Théorème de Francis Bach	7
7	Résultats théoriques	8
7.1	Régression linéaire	8
7.2	Minimisation par descente de gradient	13
7.2.1	Descente de gradient simple	13
7.2.2	Descente de gradient à pas variable	15
7.2.3	Analyse de la plus petite et plus grande valeur singulière	16
7.2.4	Descente de gradient stochastique	16
7.3	Expressions théorique sur les MLP	17
8	Conclusion	17
9	Bibliographie	18
10	Appendices	19
10.1	Résultats expérimentaux	19
10.1.1	Régression polynomial	19
10.1.2	Multilayer Perceptron (MLP)	23
10.2	Détails numériques	23
10.3	Pseudo-code	24
10.3.1	Modèle linéaire et pénalisé	24
10.3.2	Modèle MLP	26

1 Introduction

Le concept de double descente est un concept introduit en 2019 par Belkin [4] pour décrire un phénomène rencontré en machine learning: lorsque la complexité du modèle augmente l'erreur de généralisation tend à augmenter puis à diminuer de nouveau. Nous formaliserons cela au début du rapport.

Ce phénomène a été observé expérimentalement [9] dans le contexte de diverses méthodes d'optimisations, et divers modèles. Cependant il reste encore aujourd'hui difficile à prouver analytiquement. Il a été étudié de nombreuses fois par exemple par: [1, 3, 7, 9] ... L'enjeu étant de le comprendre, d'en comprendre l'origine et de parvenir à trouver des conditions d'apparitions à ce phénomène.

En effet il est utile de parvenir à le contrôler afin de pouvoir l'éliminer ou au contraire le faire survenir. En fonction de si l'on veut avoir une descente monotone ou un meilleur minimum.

Nous allons donc premièrement présenter le contexte général du problème mathématique ainsi qu'une définition de la double descente. Puis nous allons présenter un état de l'art et ensuite quelques théorèmes existants intéressants.

Enfin, nous apporterons des éléments de réponse concernant le modèle linéaire par pseudo-inverse, et puis par descente de gradient.

2 Présentation du problème

Définition: Fonction cible

On pose $\mathcal{X} = \mathbb{R}^D$ espace de départ et $\mathcal{Y} = \mathbb{R}$ espace d'arrivée.

On souhaite approximer une fonction y^* avec \mathbf{X} et \mathbf{Y} des variables aléatoires tel que $(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) \hookrightarrow \mathcal{P}$.

$$y^* : x \in \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{E}_{(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) \sim \mathcal{P}}(\mathbf{Y} | \mathbf{X} = x) \in \mathcal{Y}$$

Ici, y^* représente la fonction que l'on cherche à estimer, mais nous ne disposons pour cela que d'un échantillon de données, définit ci-dessous.

Définition: Échantillons

On se base sur un **échantillon d'apprentissage** $\mathcal{D} := \{(x_n, y_n) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}\}_{n=1}^N$ où $y_n := y^*(x_n) + \epsilon_n$.

Et les $x_n \hookrightarrow \mathbf{X}$ iid. On modélise ici : $\mathbf{Y} = y^*(\mathbf{X}) + \epsilon$ où ϵ représente le bruit tel que $\mathbb{E}(\epsilon | \mathbf{X}) = 0$, et $\mathbb{V}(\epsilon) = \sigma_\epsilon^2$.

Définition: Estimateur

- On veut trouver déterminer un **estimateur** $\hat{y} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ tel que $\hat{y}(\mathbf{X}) \approx \mathbf{Y}$ (au sens du risque ci-dessous).
- $\hat{y} \in \mathcal{H}$ un espace de fonctions.

La **complexité** de \mathcal{H} est représentée ici par P le nombre de paramètres, bien que la meilleure notion actuelle de complexité est la complexité de Rademacher [10] qui est la capacité d'une classe de fonctions à s'adapter à du bruit.

Définition: Vrai risque, risque empirique et excès de risque

Vrai risque et risque empirique: $\forall \hat{y} \in \mathcal{H}$

$$\mathcal{R}(\hat{y}) = \mathbb{E}_{(\mathbf{X}, \mathbf{Y}) \sim \mathcal{P}}((\mathbf{Y} - \hat{y}(\mathbf{X}))^2), \quad \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}(x_i))^2$$

Excès de risque: $\forall \hat{y} \in \mathcal{H}$

$$\mathcal{E}(\hat{y}) = \mathcal{R}(\hat{y}) - \mathcal{R}(y^*)$$

Ici, le vrai risque correspond à la vraie erreur que fait l'estimateur par rapport à la fonction de perte $\mathcal{L}(y, y') = (y - y')^2$. Cependant, en pratique nous n'avons pas accès à cette erreur, d'où l'utilité du risque empirique, qui converge par loi des grands nombres vers ce vrai risque.

Pour étudier les différents modèles, il est intéressant d'étudier l'excès de risque car il s'agit de l'erreur relativement à la fonction cible. Cela revient intuitivement à considérer l'erreur réalisée sans bruit, étant donnée que si $\epsilon = 0$ alors $\mathcal{R}(y^*) = 0$.

3 Régimes et Double Descente

Nous allons ici définir notre problème et donner une définition à la double descente dans le contexte de nos modèles.

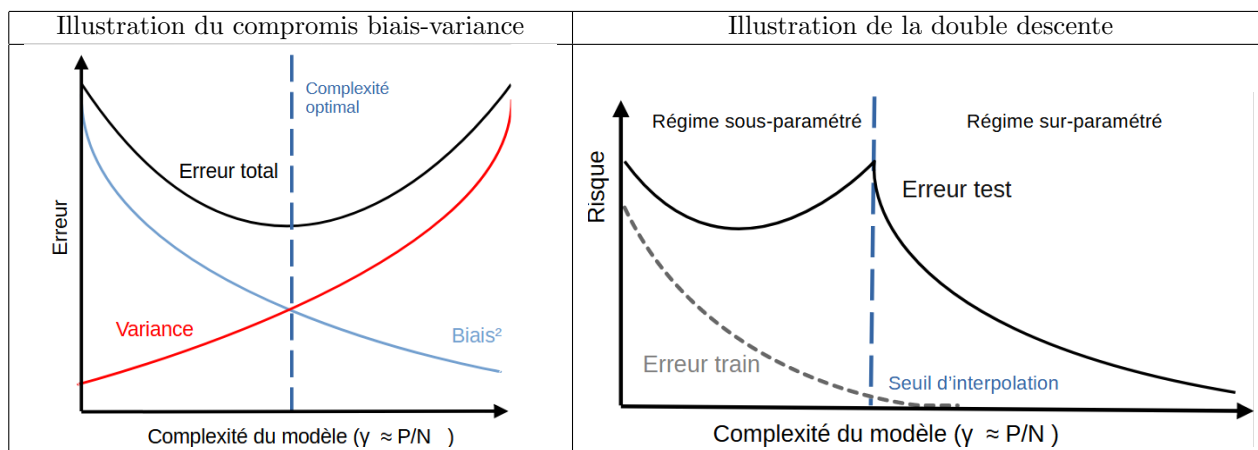
Notions de régimes:

- **Régime sous-paramétré:** $P < N$ et **régime sur-paramétré:** $P > N$
- **Seuil d'interpolation:** $P = N$

Définition: Notion de Double Descente:

On dit qu'il y a **double descente** quand l'erreur global minimal dans le régime sur-paramétré est inférieur à celle dans le régime sous-paramétré et qu'on observe un maximum au seuil d'interpolation.

En réalité, la double descente est ce même phénomène mais relativement à la complexité de la classe de fonctions [4].



4 Modèles

Nous allons ici définir les différents modèles utilisés pour traiter notre problème.

4.1 Modèle par MLP: (Multilayer Perceptron)

Définition: Modèle MLP

- $\hat{y}_\beta(x) = W_L \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ W_1(x)$, $W_l(x_l) = A_l x_l + b_l$ où $A_l \in \mathcal{M}_{S_l, E_l}(\mathbb{R})$ et $b_l \in \mathbb{R}^{S_l}$ tel que $S_l = E_{l+1}$
- $\sigma(x) = \max(0, x)$ fonction ReLU.
- On optimise $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}$ par descente de gradient (stochastique) selon le paramètre $\beta = \begin{bmatrix} A_l \\ b_l \end{bmatrix}_{l \in [1, L]}$.

En pratique, on utilise ce type de modèle, mais leur analyse étant assez compliqué, on préfère étudier le modèle suivant plus simple.

4.2 Modèles linéaires

Définition: Pseudo-inverse

Soit $Z \in \mathcal{M}_{N, P}(\mathbb{R})$, on définit Z^\dagger le pseudo-inverse de Z : en notant $R = \text{rg}(Z)$, $U \in \mathcal{O}_N(\mathbb{R})$ et $V \in \mathcal{O}_P(\mathbb{R})$
Avec $Z = U \begin{bmatrix} \Sigma_R & 0_{R, P-R} \\ 0_{N-R, R} & 0_{N-R, P-R} \end{bmatrix} V^T$ la décomposition en valeur singulière de Z , alors $Z^\dagger = V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T$.

Définition: Modèle linéaire

- $\mathcal{F} = \{f_i : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}, i \in \mathbb{N}\}$ ensemble de features.
- $X = [x_1, \dots, x_N]^T \in \mathcal{M}_{N, D}(\mathbb{R})$, $Y = [y_1, \dots, y_N]^T$
- $\forall x \in \mathcal{X}$, $\Phi_P(x) = [f_1(x), \dots, f_P(x)]^T$ et $Z = [\Phi_P(x_1), \dots, \Phi_P(x_N)]^T = [f_j(x_i)] \in \mathcal{M}_{N, P}(\mathbb{R})$
- Risque empirique $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_\beta) = \frac{1}{N} \|Y - Z\beta\|_2^2$
- $\forall x \in \mathcal{X}$, $\hat{y}_{\hat{\beta}}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$, pour $\hat{\beta} = Z^\dagger Y$ qui minimise le risque empirique.
- Modèle simple $f_i(x) = e_i(x)$ et $X = Z$

4.3 Modèle linéaire pénalisé (Ridge Regression)

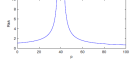
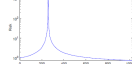
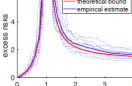
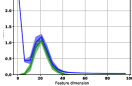
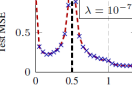
Définition: Modèle linéaire pénalisé

- Risque empirique pénalisé $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}, \lambda}(\hat{y}_\beta) = \|Y - Z\beta\|_2^2 + \lambda \|\beta\|_2^2$ où $\lambda > 0$.
- $\forall x \in \mathcal{X}$, $\hat{y}_{\hat{\beta}_\lambda}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}_\lambda$, pour $\hat{\beta}_\lambda = (Z^T Z + \lambda I_P)^{-1} Z^T Y$ qui minimise le risque empirique pénalisé.

Le terme $\|\beta\|_2^2$ dans le risque empirique pénalisé est le terme de pénalisation, qui est minimisé proportionnellement à λ . Ce terme permet d'une certaine façon de limiter la complexité de l'estimateur associé. Ainsi, on cherche notre solution parmi des solutions de moindre norme, i.e. en un certain sens de moindre complexité.

Pour $\lambda \rightarrow 0$, on retrouve le pseudo-inverse et pour $\lambda \rightarrow +\infty$ on obtient la solution nulle.

5 Etat de l'art

	Features/Modèle	Résultats	Méthodes	Graphes	Méthode d'optimisation
Belkin et al. [3]	$f_p(x) = e_{i_p}(x)$, coordonnées aléatoires	Expression du vrai risque, non-asymptotique	Inverse de Wishart		Pseudo-inverse
Belkin et al. [3]	$f_p(\omega) = \omega^{i_p}$ sur le cercle complexe Racine de l'unité pour l'échantillon \mathcal{D} .	Équivalent du vrai risque, asymptotique	Transformée de Stieltjes		Pseudo-inverse
Francis Bach [1]	$\hat{y}(x) = (S^T x)^T \hat{\beta}$ et $Z = XS$ où S matrice de vecteurs sub-Gaussien.	Équivalent du risque d'excès, asymptotique	Transformée de Stieltjes		Pseudo-inverse
Kuzborskij et al. [7]	$f_p(x) = e_p(x)$	Majoration du vrai risque non-asymptotique	Inégalité de concentration		Descente de gradient
Zhenyu et al. [8]	$f_p(x) = \cos(v_p^T x)$ et $f_p(x) = \sin(v_p^T x)$	Limite MSE, asymptotique	Étude de la résolvante		Pseudo-inverse

6 Focus techniques

Nous allons étudier quelques théorèmes existants particulièrement intéressants pour comprendre le phénomène de double descente dans le cas du modèle linéaire. Nous noterons E le nombre de degré de liberté de la fonction cible, i.e. $\beta^* \in \mathbb{R}^E$ où β^* est le paramètre associé à la fonction cible.

6.1 Théorèmes de Belkin et al.

Théorème: Belkin et al.- base canonique [3]

Dans le cas où l'on sélectionne de manière uniforme P coordonnées parmi les $E := D$ coordonnées de la base canonique comme features et que x suit une loi normal standard. Si l'on suppose $y^*(x) = x^T \beta^*$, avec un bruit gaussien.

- Si $P < N - 1$:

$$\mathbb{E}_{\mathcal{D}}(\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) = [(1 - \frac{P}{E}) \cdot \|\beta^*\|_2^2 + \sigma_{\epsilon}^2](1 + \frac{P}{N - P - 1}) \quad (1)$$

- Si $P > N + 1$:

$$\mathbb{E}_{\mathcal{D}}(\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) = \|\beta^*\|_2^2 \cdot [1 - \frac{N}{E}(2 - \frac{E - N - 1}{P - N - 1})] + \sigma_{\epsilon}^2(1 + \frac{N}{P - N - 1}) \quad (2)$$

- Sinon:

$$\mathbb{E}_{\mathbf{X}}(\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) = +\infty \quad (3)$$

Éléments de preuve:

La preuve se déroule en plusieurs étapes: On note en indice une extraction sur les lignes. On commence par poser $T \in \llbracket 1, D \rrbracket^P$ variable aléatoire uniforme et $\hat{\beta}_T = X_T^\dagger Y$, $\hat{\beta}_{T^c} = 0$. On montre ces égalités dans l'ordre suivant: On pose $\eta_\epsilon = Y - X_T \beta_T^*$.

$$\mathcal{R}(\hat{y}) = \sigma_\epsilon^2 + \|\beta_T^* - \hat{\beta}_T\|_2^2 + \|\beta_{T^c}^*\|_2^2 \quad \text{et} \quad \|\beta_T^* - \hat{\beta}_T\|_2^2 = \|\beta_T^*\|_2^2 - \|X_T^T(X_T X_T^T)^\dagger X_T \beta_T^*\|_2^2 + \|X_T^T(X_T X_T^T)^\dagger \eta_\epsilon\|_2^2$$

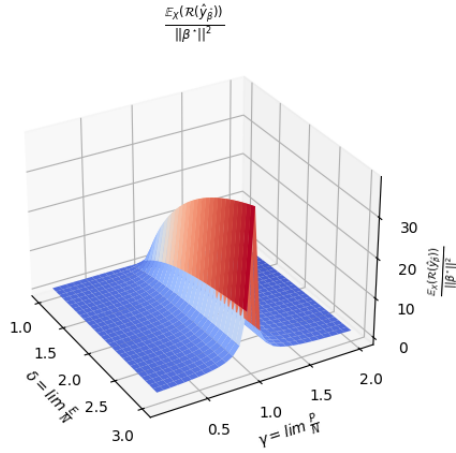
Par Pythagore et propriété de projecteur de $X_T^T(X_T X_T^T)^\dagger X_T$

$$\mathbb{E}(\|X_T^T(X_T X_T^T)^\dagger \eta_\epsilon\|_2^2) = (\|\beta_{T^c}^*\|_2^2 + \sigma_\epsilon^2) \text{tr}[\mathbb{E}((X_T X_T^T)^\dagger)] \quad \# \text{ On reconnaît l'inverse de Wishart.}$$

Enfin on passe à l'espérance sur T. Et on a le résultat attendu. \square

Pour $\sigma_\epsilon = 0$ et avec $N \rightarrow +\infty$, $E \setminus N \rightarrow \delta$ et $P \setminus N \rightarrow \gamma$ nous avons: (attention le modèle implique $\gamma \leq \delta$)

$$\underline{\text{Si } \gamma < 1 : \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) \sim \frac{1}{1-\gamma} \left[1 - \frac{\gamma}{\delta}\right] \cdot \|\beta^*\|_2^2} \quad \underline{\text{Si } \gamma > 1 : \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) \sim \left[1 - \frac{2}{\delta} + \frac{1}{\delta} \frac{\delta-1}{\gamma-1}\right] \cdot \|\beta^*\|_2^2}$$



Ainsi, ce théorème exprime le risque moyenné sur l'échantillon.

Il montre bien le phénomène de double descente en exhibant une divergence au seuil d'interpolation i.e. $\gamma = 1$.

De plus δ permet d'estimer si oui ou non un minimum inférieur sera atteint en régime sur-paramétré.

La seule limite de ce modèle est qu'il est restreint à des lois normales, et nous en explorerons une généralisation dans la suite du rapport.

6.2 Théorème de Kuzborskij et al.

Théorème: Kuzborskij et al[7] en régime sur-paramétré

On pose $\hat{\beta}_t$ le vecteur obtenu au bout de t itérations de descente de gradient de pas α . On se place ici dans le cadre du modèle linéaire simple, en se plaçant dans l'hypothèse isotropique et sub-gaussien. On note σ_{\min} la plus petite valeur singulière.

$$\mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t}) \lesssim \left[\left(1 - \frac{2\alpha}{N} \sigma_{\min}(X^T X)\right)^{2t} + \frac{1}{\sqrt{N}} \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2 \quad (4)$$

Remarque:

Hypothèse isotropique: $\mathbb{E}(X X^T) = I_N$

Hypothèse sub-gaussien: X est sub-gaussien si et seulement si $\forall Y \in \mathbb{R}^N$, $X^T Y$ est sub-gaussien i.e. $\exists C, \forall t \geq 0, \mathbb{P}(|X^T Y| \geq t) \leq 2e^{-t^2/C^2}$.

L'intérêt de ce théorème est qu'il permet d'observer les éléments responsable d'une double descente dans le cas de la descente de gradient. En effet, on observe ici l'importance de la plus petite valeur singulière de Z. Et nous étudions plus en détail son importance dans la partie 7.2.2.

6.3 Théorème de Francis Bach

Théorème: Francis Bach[1]

On pose $df_i(\lambda) = \text{tr}(\Sigma^i(\Sigma + \lambda I_D)^{-i})$, $df_1(K_P) \sim P$, $df_1(K_N) \sim N$. On a ici $E := D$. On suppose ici $y^*(x) = x^T S \beta^*$. Ici, $S \in \mathcal{M}_{D,P}(\mathbb{R})$ est une projection aléatoire. Et $\Sigma := \mathbb{E}(X^T X)$. On pose $\hat{\mathcal{R}}_\Sigma(\hat{y}_{\hat{\beta}}) := \|\hat{\beta} - \beta^*\|_\Sigma^2 = (\hat{\beta} - \beta^*)^T \Sigma (\hat{\beta} - \beta^*)$. Alors avec $\hat{\mathcal{R}}_\Sigma^{(var)}$ pour $\beta^* = 0$ et $\hat{\mathcal{R}}_\Sigma^{(bias)}$ pour $\epsilon = 0$, et sous certaines hypothèses (vecteurs sub-Gaussiens iid) tel que $N \rightarrow +\infty$, $\frac{P}{N} \rightarrow \gamma$ et $\frac{E}{N} \rightarrow \delta$.

- Si $\gamma < 1$:

$$\mathbb{E}_\epsilon(\mathcal{R}_\Sigma^{(var)}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) \sim \frac{\sigma_\epsilon^2 \gamma}{1 - \gamma}$$

$$\mathcal{R}_\Sigma^{(bias)}(\hat{\beta}) \sim \frac{K_P}{1 - \gamma} \|\beta^*\|_{\Sigma(\Sigma + K_P I)^{-1}}^2$$

- Si $\gamma > 1$:

$$\mathbb{E}_\epsilon(\mathcal{R}_\Sigma^{(var)}(\hat{y}_{\hat{\beta}})) \sim \frac{\sigma_\epsilon^2}{\gamma - 1} + \frac{\sigma_\epsilon^2 df_2(K_N)}{df_1(K_N) - df_2(K_N)}$$

$$\mathcal{R}_\Sigma^{(bias)}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) \sim K_N^2 \frac{df_1(K_N)}{df_1(K_N) - df_2(K_N)} \|\beta^*\|_{\Sigma(\Sigma + K_N I)^{-2}}^2 + \frac{K_N}{\gamma - 1} \|\beta^*\|_{\Sigma(\Sigma + K_N I)^{-1}}^2$$

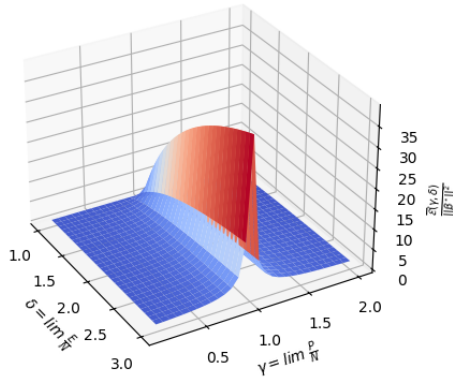
Éléments de preuve:

On utilise la transformée de Stiejes $\forall z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}_+$, $\hat{\Phi}(z) = \text{tr}[(XX^T + NzI_N)^{-1}]$. On utilise la limite $\lambda \rightarrow 0$ de la solution du problème pénalisé. Pour cela on pose $\hat{\Sigma} = \frac{1}{N} X^T X$ et on remarque que $\hat{\beta} = (\hat{\Sigma} + \lambda I_D)^{-1} \hat{\Sigma} S \beta_\star + \frac{1}{N} (\hat{\Sigma} + \lambda I_D)^{-1} X^T \epsilon$. Ensuite on passe de $\hat{\Sigma}$ à Σ par des propriétés de la transformée de Stiejes. \square

Application au modèle quasi-isotrope: Dans le cadre de $\Sigma = \sigma_\Sigma^2 I_D$ on trouve:

$$\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) := \mathcal{R}_{I_D}^{(bias)}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) \sim \frac{\sigma_\Sigma^2}{|1 - \gamma|} \left[\max(1, \gamma) - \frac{\gamma}{\delta} \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2 \quad (5)$$

$$\frac{\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta)}{\sigma_\Sigma^2 \|\beta^*\|_2^2} = \frac{1}{|1 - \gamma|} [\max(1, \gamma) - \frac{\gamma}{\delta}]$$



Ainsi, ce théorème de Francis Bach permet de donner un équivalent asymptotique de l'erreur relative au bruit et à la fonction cible, et ce pour diverses distributions de \mathbf{X} .

De plus, il permet bien de justifier d'un phénomène de double descente 5. Enfin il décorrèle de manière singulière le nombre de paramètres de la dimension du problème à l'aide d'un projecteur.

7 Résultats théoriques

7.1 Régression linéaire

Nous avons choisi de nous intéresser à une base de features orthonormée de polynômes sur un cube I il s'agit intuitivement d'une base adaptée au problème. De plus elle rend plus aisée les expériences numériques. Enfin, elle fait apparaître expérimentalement un phénomène de double descente. Ce qui n'est pas toujours le cas avec la base canonique, voir l'expérience suivante: 4. D'où le cadre de notre étude ici.

On considère: $\Phi_P(x) = [f_1(x), \dots, f_P(x)]^T$ où $f_p: \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ et $\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$.

Avec $(f, g)_X = \sum_{n=1}^N f(x_n)g(x_n)$, $\{f, g\} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(e^{i\theta})\overline{g(e^{i\theta})}$ et $\forall z \in \mathbb{C}, G_P^x(z) = \sum_{p=1}^P f_p(x)z^p$.

Définition: Base de features orthonormées

On dit ici que $\mathcal{F} = \{f_0, f_1, \dots, f_P\}$ est orthonormée par rapport à \mathbf{X} si et seulement si:

- $f_0 = \tilde{\sigma}_\Phi$
- $\forall p, q \in \llbracket 0, P \rrbracket, \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(f_p(\mathbf{X})f_q(\mathbf{X})) = \sigma_\Phi^2 \delta_{p,q}$

Remarque:

Ce modèle implique que l'on considère ici des fonctions de "moyenne" nulle i.e. $\forall p \geq 1, \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(f_p(\mathbf{X})) = 0$.
En effet on a $\forall p \geq 1, \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(f_p(\mathbf{X})) = \frac{1}{\sigma_\Phi} \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(f_0(\mathbf{X})f_p(\mathbf{X})) = 0$.

Théorème: Expressions de l'estimateur

Dans le cas linéaire càd tel que $\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$ nous avons:

$$\forall x \in \mathcal{X}, \hat{y}(x) = [f_1(x), \dots, f_P(x)] [(f_i, f_j)_X]^\dagger \begin{bmatrix} (f_1, y)_X \\ \vdots \\ (f_P, y)_X \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$\forall x \in \mathcal{X}, \hat{y}(x) = ([\{G_P^{x_i}, G_P^{x_j}\}]^\dagger [\{G_P^x, G_P^{x_j}\}])^T Y \quad (7)$$

Démonstration:

On a de manière général, $X^\dagger = (X^T X)^\dagger X^T = X^T (X X^T)^\dagger$. On applique donc cela à l'égalité $\hat{\beta} = Z^\dagger Y$, puis à $\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$. Enfin, on remarque :

$$\{G_P^{x_i}, G_P^{x_j}\} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} G_P^{x_i}(e^{i\theta}) \overline{G_P^{x_j}(e^{i\theta})} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\sum_{p=1}^P f_p(x_i) e^{ip\theta} \right) \left(\sum_{p=1}^P f_p(x_j) e^{-ip\theta} \right) = \sum_{p=1}^P f_p(x_i) f_p(x_j)$$

□

Remarque:

Ces expressions permettent de visualiser la forme de l'estimateur. En effet la première expression s'approche de celle du projeté orthogonal dans \mathcal{L}_2 lorsque $N \rightarrow +\infty$.

Et la deuxième expression permet de constater que le risque empirique s'annule bien dans le cas du rang maximale, $rg(Z) = N$.

On observe souvent expérimentalement sur le modèle linéaire que les variations du risque suivent celles de $\|\hat{\beta}\|_2$, comme on peut le voir avec la figure 2. Il est donc pertinent d'étudier sa monotonie en régime sur-paramétré. On constate que $\|\hat{\beta}\|_2$ est décroissant à partir d'un certain rang avec le théorème suivant.

Théorème: Décroissance du paramètre $\hat{\beta}$

Dans le régime sur-paramétré, $\|\hat{\beta}_P\|_2$ est décroissante à partir du moment où le rang de la matrice Z_P devient maximale i.e $rg(Z_P) = N$.

Démonstration:

On note ici Z_P la matrice Z avec P features. En supposant $rg(Z_P) = N$, nous avons ce résultat par l'étude du Lagrangien [9]. Le vecteur $\hat{\beta}_P$ est un minimum global pour la norme euclidienne dans l'espace affine $\hat{\beta}_P + Ker(Z_P) = \{\beta, Y = Z_P\beta\}$ car avec:

$$\forall \beta \in \mathbb{R}^P, \forall \gamma \in \mathbb{R}^N \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = \|\beta\|_2^2 + \gamma^T(Y - Z_P\beta) \quad (8)$$

L'unique solution de $\nabla \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = 0$ i.e. $\nabla_{\beta} \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = 2\beta - Z_P^T \gamma = 0$ et $\nabla_{\gamma} \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = Y - Z_P\beta = 0$ est $\hat{\beta}_P$ car $rg(Z_P) = N$ et donc $Z_P Z_P^T$ est inversible. C'est donc l'unique solution de $Y = Z_P\beta$ de norme minimale. Et on a $\hat{\beta}'_{P+1} := \begin{bmatrix} \hat{\beta}_P \\ 0 \end{bmatrix}$ est aussi solution de $Y = Z_{P+1}\beta$ donc $\|\hat{\beta}_{P+1}\|_2 \leq \|\hat{\beta}'_{P+1}\|_2 = \|\hat{\beta}_P\|_2$.

□

Remarque:

Ce phénomène ($rg(Z_P) = N$) survient à partir d'un certain rang P si par exemple une seule des coordonnées dans une base est différente 2 à 2 sur l'échantillon, dans le cas de la régression polynomial à D variables. Car il suffit de pouvoir extraire une matrice de Vandermonde (quitte à changer de base).

On pose E paramètres pour l'espace global, et on note les P premiers paramètres par P et P^C les $E-P$ derniers paramètres parmi ces E paramètres. Ainsi: $\mathcal{F} := \{f_1, \dots, f_P, \dots, f_E\}$.

On note ici Z_P la matrice Z avec P features, i.e. $Z_P := \Phi_P^T(X)$, $Z_{P^C} := \Phi_{P^C}^T(X)$ et $Z_E := [Z_P, Z_{P^C}] = \Phi_E^T(X)$. Nous allons maintenant décomposer l'excès de risque en trois termes que l'on exprimera en fonctions des matrices de features et de β^* .

Théorème: Expression de l'excès de risque

On pose $\Phi_E(x) = \begin{bmatrix} \Phi_P(x) \\ \Phi_{P^C}(x) \end{bmatrix}$ et $\mathcal{E}(\hat{y}, \beta^*) := \mathcal{R}(\hat{y}) - \mathcal{R}(y^*)$, où l'on suppose $y^*(x) = \Phi_E(x)^T \beta^*$ avec $E \in \mathbb{N}$ features. On suppose ici $\mathbb{E}(\Phi_E(\mathbf{X})\Phi_E(\mathbf{X})^T) = \sigma_{\Phi}^2 I_E$.

On a alors:

$$\sigma_{\Phi}^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}, \beta^*) = \|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2 = \|\beta^*\|_2^2 + \|Z_P^{\dagger} Z_{P^C} \beta_{P^C}^*\|_2^2 - \text{tr}[(Z_P^{\dagger} Z_P) \beta_P^* \beta_P^{*T}] \quad (9)$$

Démonstration:

On s'inspire de la preuve de Belkin et al [3]. On note de même β_P pour parler de P composante de β , de même pour les vecteurs colonnes des matrices. On note β_{P^C} pour les autres composantes.

$\mathcal{R}(\hat{y}) = \mathbb{E}_{\mathcal{P}}((\mathbf{Y} - \hat{y}(\mathbf{X}))^2) = \mathbb{E}_{\mathcal{P}}((\mathbf{Y} - y^*(\mathbf{X}) + y^*(\mathbf{X}) - \hat{y}(\mathbf{X}))^2) = \mathcal{R}(y^*) + \mathbb{E}_{\mathcal{P}}((y^*(\mathbf{X}) - \hat{y}(\mathbf{X}))^2)$
car $\mathbb{E}_{\mathcal{P}}(\mathbf{Y} - y^*(\mathbf{X})|\mathbf{X}) = 0$ par hypothèse sur le bruit dans notre modèle.

Ainsi, on a $\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) - \mathcal{R}(y^*) = \text{tr}[\mathbb{E}_{\mathbf{X}}(\Phi_E(\mathbf{X})\Phi_E(\mathbf{X})^T)(\hat{\beta} - \beta^*)(\hat{\beta} - \beta^*)^T] = \sigma_{\Phi}^2 \|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2$.

On a $Y = Z_E \beta^*$ et $Z_E = [Z_P, Z_{P^C}]$. D'où $Y = Z_P \beta_P^* + Z_{P^C} \beta_{P^C}^*$. On pose $\Pi_{Z_P} := Z_P^{\dagger} Z_P$ le projecteur orthogonale sur $Im(Z_P^{\dagger})$. De plus on a $\hat{\beta}_P = Z_P^{\dagger} Y = Z_P^{\dagger} (Z_P \beta_P^* + Z_{P^C} \beta_{P^C}^*)$ et $\hat{\beta}_{P^C} = 0$.

On a alors: $\|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2 = \|\hat{\beta}_P - \beta_P^*\|_2^2 + \|\beta_{P^C}^*\|_2^2 = \|(\Pi_{Z_P} - I_P) \beta_P^*\|_2^2 + \|Z_P^{\dagger} Z_{P^C} \beta_{P^C}^*\|_2^2 + \|\beta_{P^C}^*\|_2^2$, par les propriétés de projecteur.

De plus on a de même: $\|(\Pi_{Z_P} - I_P) \beta_P^*\|_2^2 = \text{tr}[\beta_P^{*T} (\Pi_{Z_P} - I_P)^T (\Pi_{Z_P} - I_P) \beta_P^*] = \|\beta_P^*\|_2^2 - \text{tr}[\Pi_{Z_P} \beta_P^* \beta_P^{*T}]$.

D'où $\mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}, \beta^*) = \sigma_{\Phi}^2 \cdot (\|\beta^*\|_2^2 + \|Z_P^{\dagger} Z_{P^C} \beta_{P^C}^*\|_2^2 - \text{tr}[\Pi_{Z_P} \beta_P^* \beta_P^{*T}])$.

□

L'excès de risque se décompose donc en trois termes, le premier $\|\beta^*\|_2^2$ étant la norme de la fonction cible, et les deux suivant s'approchent de projections de la fonction cible. Le deuxième terme $\|Z_P^\dagger Z_{PC} \beta_{PC}^*\|_2^2$ correspond au paramètre β_{PC}^* de la fonction cible encore non observé par l'estimateur. Il est mis en facteur par un quotient de matrices de features. C'est de ce terme que provient la double descente. Et le dernier terme $\text{tr}[\Pi_{Z_P} \beta_P^* \beta_P^{*T}]$ correspondra à un rang de matrice. C'est un terme croissant.

Remarque:

On peut par exemple prendre comme features une base de polynômes orthonormées sur un cube $I = \prod_{d=1}^D [a_d, b_d]$, que l'on peut obtenir par processus de Gram-Schmidt (algorithme 1). Et en prenant $\mathbf{x} \mapsto \mathcal{U}(I)$ i.e. suivant une loi uniforme du cube I : alors cette base est orthonormée par rapport à \mathbf{x} au sens de notre définition.

Dans le cas d'une base orthonormée on a $\mathbb{E}_{\mathbf{X}}(f_i(\mathbf{X})f_j(\mathbf{X})) = \sigma_\Phi^2 \delta_{i,j}$. Ainsi on a bien: $\mathbb{E}_{\mathbf{X}}(\Phi_E(\mathbf{X})\Phi_E(\mathbf{X})^T) = \sigma_\Phi^2 I_E$.

De plus on a $\forall p \geq 1, \mathbb{E}_{\mathbf{X}}(f_p(\mathbf{X})) = 0$. Donc $\mathbb{E}(\Phi_P(\mathbf{X})) = 0$. Ainsi, en posant $z_i = \mathbb{E}(\Phi_P(x_i)) \in \mathbb{R}^P$, les z_i sont indépendants par lemme de coalition, de moyenne nulle, et même variance, on se place donc dans le contexte de la distribution de "Marchenko–Pastur" [5]. Cette distribution donne comme résultats théoriques la distribution de probabilité et la transformée de Stiejes de la matrice $\frac{1}{N} Z_P Z_P^T$ asymptotiquement.

Corollaire: Expression de l'excès de risque moyen

On modélise ici β^* par une variable aléatoire tel que $\mathbb{E}(\beta^* \beta^{*T}) = \sigma_{\beta^*}^2 I_E$. On pose $\mathcal{E}_{moyen}(\hat{y}) := \mathbb{E}_{\beta^*}(\mathcal{E}(\hat{y}, \beta^*))$.

$$(\sigma_\Phi \sigma_{\beta^*})^{-2} \mathcal{E}_{moyen}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = E - 2rg(Z_P) + \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \quad (10)$$

Démonstration:

On a $\|Z_P^\dagger Z_{PC} \beta_{PC}^*\|_2^2 = \text{tr}[Z_{PC}^T (Z_P Z_P^T)^\dagger Z_{PC} \beta_{PC}^* \beta_{PC}^{*T}]$ d'où:

$$\sigma_\Phi^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}, \beta^*) = \|\beta^*\|_2^2 - \text{tr}[(Z_P^\dagger Z_P) \beta_P^* \beta_P^{*T}] + \text{tr}[Z_{PC}^T (Z_P Z_P^T)^\dagger Z_{PC} \beta_{PC}^* \beta_{PC}^{*T}]$$

On a supposé que $\mathbb{E}(\beta^* \beta^{*T}) = \sigma_{\beta^*}^2 I_E$.

On a $\sigma_\Phi^{-2} \mathcal{E}_{moyen}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \mathbb{E}(\|\beta^*\|_2^2) - \text{tr}[Z_P^\dagger Z_P \mathbb{E}(\beta_P^* \beta_P^{*T})] + \text{tr}[Z_{PC} Z_{PC}^T (Z_P Z_P^T)^\dagger \mathbb{E}(\beta_{PC}^* \beta_{PC}^{*T})]$.

D'où $(\sigma_\Phi \sigma_{\beta^*})^{-2} \mathcal{E}_{moyen}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = E - \text{tr}(Z_P^\dagger Z_P) + \text{tr}[(Z_{PC} Z_{PC}^T) (Z_P Z_P^T)^\dagger]$.

Or $Z_E Z_E^T = Z_P Z_P^T + Z_{PC} Z_{PC}^T$, d'où:

$$\text{tr}[(Z_{PC} Z_{PC}^T) (Z_P Z_P^T)^\dagger] = \text{tr}[(Z_E Z_E^T) (Z_P Z_P^T)^\dagger] - \text{tr}[Z_P Z_P^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] = \text{tr}[(Z_E Z_E^T) (Z_P Z_P^T)^\dagger] - rg(Z_P)$$

En effet la trace d'un projecteur est son rang, et $rg(X X^T) = rg(X)$. Donc de même $\text{tr}(\Pi_{Z_P}) = rg(Z_P)$.

Ainsi $(\sigma_\Phi \sigma_{\beta^*})^{-2} \mathcal{E}_{moyen}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = E - 2rg(Z_P) + \text{tr}[(Z_E Z_E^T) (Z_P Z_P^T)^\dagger]$.

□

Considérer \mathcal{E}_{moyen} est pertinent, car cela revient à moyenner l'excès de risque sur un ensemble de fonctions cibles. C'est à dire considérer $\{y_1^*, y_2^*, \dots\}$, muni d'une distribution de probabilité tel que $\mathbb{E}(\beta^* \beta^{*T}) = \sigma_{\beta^*}^2 I_E$.

Conjecture: Limite du quotient de matrices aléatoires suivant une distribution de Marchenko-Pastur

$$\lim_{N \rightarrow +\infty, \frac{P}{N} \rightarrow \gamma, \frac{E}{N} \rightarrow \delta} \frac{1}{\min(P, N)} \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] = \left| \frac{1 - \delta}{1 - \gamma} \right|$$

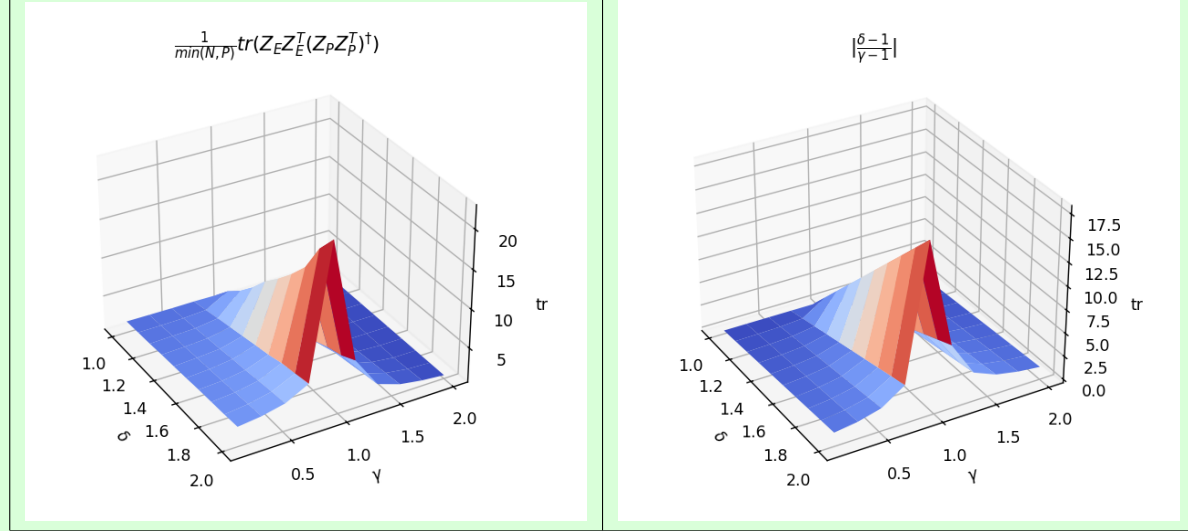
Remarque:

Théorie: Pour tenter de prouver la conjecture, on pourrait tenter d'utiliser:

Le lemme de Francis Bach page 8 dans le papier [1].

Et on peut aussi tenter d'utiliser la "distribution de Marchenko-Pastur" sur $\frac{1}{N} Z_P Z_P^T$. Remarque, le quotient normalise la variance, on peut considérer $\sigma_\Phi = 1$.

Expérimentale: Justification expérimentale de la conjecture: (avec loi normale tel que $\sigma = 1$, pour $N = 500$)



Théorème: Expression de l'excès de risque moyen asymptotique, cas du rang maximal

En prenant pour hypothèse la conjecture précédente.

En supposant : $\mathbb{E}(\beta^* \beta^{*T}) = \frac{\|\beta^*\|_2^2}{E} I_E$, $rg(Z_P) = \min(P, N)$, et \mathcal{F} features orthonormées par rapport à \mathbf{X} .

$$\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) := \lim_{N \rightarrow +\infty, \frac{P}{N} \rightarrow \gamma, \frac{E}{N} \rightarrow \delta} \mathcal{E}_{\text{moyen}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \sigma_\Phi^2 \left[1 + \frac{\min(\gamma, 1)}{\delta} \left(-2 + \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right| \right) \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2 \quad (11)$$

Preuve:

On a supposé que $\frac{1}{\min(P, N)} \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \sim \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right|$.

- Régime sous-paramétré: (i.e. $\gamma < 1$)

$$\sigma_\Phi^{-2} \mathcal{E}_{\text{moyen}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \left[1 - \frac{2P}{E} + \frac{P}{E} \frac{1}{P} \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2$$

$$\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) = \sigma_\Phi^2 \left[1 - 2\frac{\gamma}{\delta} + \frac{\gamma}{\delta} \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2$$

- Régime sur-paramétré: (i.e. $\gamma > 1$)

$$\sigma_\Phi^{-2} \mathcal{E}_{\text{moyen}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \left[1 - \frac{2N}{E} + \frac{N}{E} \frac{1}{N} \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2$$

$$\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) = \sigma_\Phi^2 \left[1 - 2\frac{1}{\delta} + \frac{1}{\delta} \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|_2^2$$

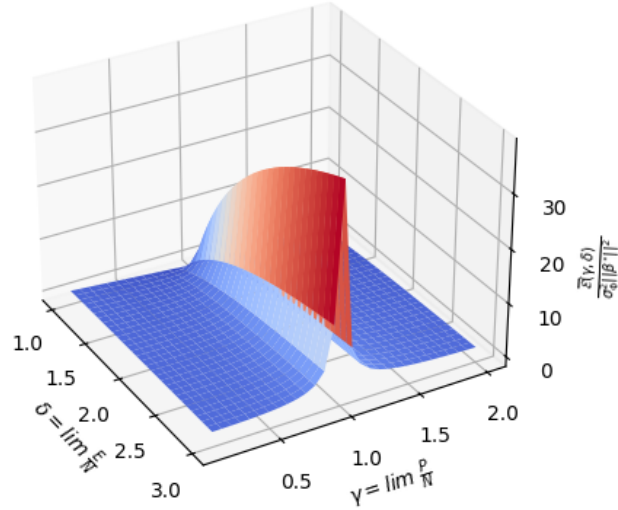
□

Remarque:

On se place dans le cadre $\|\beta^*\|_2^2 = \text{tr}(\beta^* \beta^{*T}) = \sigma_{\beta^*}^2 E = \text{constante}$. Ce choix vient du fait que l'on imagine que l'erreur aléatoire sur les termes du développement en série de nos fonctions cibles diminue lorsque l'on prend plus de termes. Cela revient à écrire sur l'ensemble des fonctions à approximer que $\mathbb{E}(\beta^*) = 0$ et $\mathbb{V}(\beta^*) = \frac{\|\beta^*\|_2^2}{E} I_E$.

On a donc avec sous hypothèse de cette conjecture un excès de risque moyen asymptotique qui présente cette forme: (attention, notre modèle implique $P \leq E$ d'où $\gamma \leq \delta$).

$$\frac{\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta)}{\sigma_{\Phi}^2 \|\beta^*\|^2} = [1 - 2 \frac{\min(\gamma, 1)}{\delta} + \frac{\min(\gamma, 1)}{\delta} |\frac{1-\delta}{1-\gamma}|]$$



Pour $E = P$ on trouve alors $\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) = \sigma_{\Phi}^2 \max(0, (1 - \frac{1}{\gamma})) \cdot \|\beta^*\|_2^2$ et on n'a pas de double descente. Mais pour $\delta > 1$ on en a une.

On est dans un cas très similaire à celui traité par Belkin [3], les seules différences étant que nous ne sommes pas dans le cas de lois normales, que le terme β_{PC}^* n'est pas supposé suivre une loi normale contrairement à η_ϵ , que l'on moyenne sur les fonctions cibles, et que nous étudions une limite asymptotique. On remarque que nous trouvons la même expression dans le régime sur-paramétré 2.

7.2 Minimisation par descente de gradient

On a avec $\hat{\beta}_t$ paramètre issu d'une descente de gradient à t étapes:

$$\sigma_{\Phi}^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t}, \beta^*) = \|\hat{\beta}_t - \beta^*\|_2^2 = \|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2^2 + 2\text{tr}[(\hat{\beta}_t - \hat{\beta})^T(\hat{\beta} - \beta^*)] + \|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2$$

Nous avons donc trois termes à étudier, le dernier terme $\|\hat{\beta} - \beta^*\|_2^2$ a déjà été étudié précédemment, car il correspond à la meilleure approximation faite par pseudo-inverse. Dans cette partie nous allons nous intéresser au premier terme: $\|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2^2$, lié à la descente de gradient. Nous évoquerons aussi une piste pour traiter le terme du milieu $\text{tr}[(\hat{\beta}_t - \hat{\beta})^T(\hat{\beta} - \beta^*)]$, que nous considérerons nulle dans un premier temps.

Définition: Optimisation par descente de gradient

- Descente de gradient simple:

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha_t \nabla \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t}) \text{ et } \hat{\beta}_0 \in \mathbb{R}^P$$

- Descente de gradient stochastique:

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha_t J_t \nabla \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}_t}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t}) \text{ et } \hat{\beta}_0 \in \mathbb{R}^P$$

où $J_t = \text{Diag}(\delta_{1,t} \cdots \delta_{P,t})$ et $\mathcal{D}_t \in \mathcal{D}^B$. Ici $\delta_{1,t}$ sont des variables aléatoires à valeur dans $\{0, 1\}$ et \mathcal{D}_t un sous-ensemble aléatoire de \mathcal{D} . Nous les munissons de lois uniformes.

J_t représente le fait qu'on ne calcule qu'une partie du gradient, et \mathcal{D}_t représente les batchs de taille B , on ne calcule le gradient que sur un sous-ensemble de l'échantillon.

7.2.1 Descente de gradient simple

La descente de gradient à pas constant est donnée par:

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha \nabla \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t})$$

On a $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}) = \frac{1}{N} \|Y - Z\hat{\beta}\|_2^2$ et $\nabla \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}) = \frac{2}{N} Z^T [Z\hat{\beta} - Y]$ ainsi $\hat{\beta}_{t+1} = [I_p - \frac{2\alpha}{N} Z^T Z] \hat{\beta}_t + \frac{2\alpha}{N} Z^T Y$.

On sait qu'avec des suites du type $x_{n+1} = ax_n + b$ on a $x_n = [\sum_{k=0}^{n-1} a^k]b + a^n x_0$.

D'où en posant $\alpha' = \frac{2\alpha}{N}$, on a:

$$\hat{\beta}_t = \left[\sum_{k=0}^{t-1} (I_p - \alpha' Z^T Z)^k \right] \alpha' Z^T Y + [I_p - \alpha' Z^T Z]^t \hat{\beta}_0$$

Théorème: Approximation par descente de gradient simple

Avec $\hat{\beta}_t$ le résultat de t descente de gradient de pas α tel que $\alpha' < \sigma_{max}^{-2}$ et $\hat{\beta}_0 = 0$. Avec $\sigma_{min} > 0$ la plus petite valeur singulière non-nulle de $Z = U\Sigma V^T$, et σ_{max} sa plus grande valeur singulière, on a:

$$\sigma_{max}^{-1} (1 - \alpha' \sigma_{max}^2)^t \|Y\|_2 \leq \|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2 \leq \sigma_{min}^{-1} (1 - \alpha' \sigma_{min}^2)^t \|Y\|_2 \quad (12)$$

On a :

$$\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T [\hat{\beta}_0 - \hat{\beta}] \quad (13)$$

Si $\hat{\beta}_0 = 0$ on a:

$$\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = -V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y \quad (14)$$

Démonstration:

On s'attend classiquement à une convergence géométrique de la descente de gradient.

Avec $R := \text{rg}(Z)$ et $Z = U\Sigma V^T$ décomposition SVD tel que $\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_R & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$. On a $Z^T Z = V\Sigma^T \Sigma V^T = V \begin{bmatrix} \Sigma_R^2 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$.

On note $\alpha' = \frac{2\alpha}{N}$. D'où $\hat{\beta}_t = V \begin{bmatrix} (\alpha' \Sigma_R^2)^{-1} [I_R - (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t] & 0 \\ 0 & t I_{P-R} \end{bmatrix} \alpha' \begin{bmatrix} \Sigma_R & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y + V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T \hat{\beta}_0$.

$\hat{\beta}_t = V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} - \Sigma_R^{-2} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t \Sigma_R & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y + V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T \hat{\beta}_0$

Si $\hat{\beta}_0 = 0$ on a l'équation 14: $\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = -V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y$

De plus on a $V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T \hat{\beta} = V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y$ ce qui donne l'équation 13.

On utilise alors le lemme : $\sigma(A)_{\min} \|X\|_2 \leq \|AX\|_2 \leq \sigma(A)_{\max} \|X\|_2$.

On peut étudier la fonction $f(\sigma) = \sigma^{-1}(1 - \alpha'\sigma^2)^t$, et on a alors deux annulations de la dérivée en $\sigma = \pm \alpha'^{-\frac{1}{2}}$.

On se place donc dans la zone de décroissance de f et les valeurs propres de $\begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, i.e. les $f(\sigma_r)$ sont positives, lorsque $\alpha' < \sigma_{\max}^{-2}$.

On a finalement le résultat attendu, 12. □

Remarque:

On retrouve ici un résultat proche de celui de la descente de gradient classique, ici $\hat{\mathcal{R}}$ étant $\mu = \frac{2}{N}$ fortement convexe. Et on remarque que notre résultat est très proche de celui de 4.

Corollaire: Résultat de la descente de gradient simple, cas du rang maximale

On suppose que $\hat{\beta}_0 = 0$ et que α le pas de la descente est constant .

- Si $P \leq N$ et $\text{rg}(Z) = P$:

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = (Z^T Z)^{-1} (I_P - \alpha' Z^T Z)^t Z^T Y \quad (15)$$

- Si $P \geq N$ et $\text{rg}(Z) = N$:

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = Z^T (I_N - \alpha' Z Z^T)^t (Z Z^T)^{-1} Y \quad (16)$$

Démonstration:

On s'attend à avoir une forme simple dans le cas du rang maximal.

- Dans le régime sous-paramétré:

On a $\hat{\beta}_t = (\sum_{k=0}^{t-1} [I_P - \alpha' Z^T Z]^k) \alpha' Z^T Y = (Z^T Z)^{-1} [I_P - (I_P - \alpha' Z^T Z)^t] Z^T Y = Z^\dagger Y - (Z^T Z)^{-1} (I_P - \alpha' Z^T Z)^t Z^T Y$.

- Dans le régime sur-paramétré:

On a ici $Z Z^T = U \Sigma_N^2 U^T$ et $Z^\dagger Y - \hat{\beta}_t = V \begin{bmatrix} \Sigma_N^{-1} (I_N - \alpha' \Sigma_N^2)^t \\ 0 \end{bmatrix} U^T Y = V \begin{bmatrix} \Sigma_N \\ 0 \end{bmatrix} (U^T U) (I_N - \alpha' \Sigma_N^2)^t (U^T U) \Sigma_N^{-2} U^T Y = (V \Sigma^T U^T) (I_N - \alpha' U \Sigma_N^2 U^T)^t (U \Sigma_N^2 U^T)^{-1} Y$.

D'où: $\hat{\beta}_t = Z^\dagger Y - Z^T (I_N - \alpha' Z Z^T)^t (Z Z^T)^{-1} Y$

□

Remarque:

Dans le régime sur-paramétré, on a pour la descente de gradient à pas constant: $\hat{\beta}_P = Z_P^\dagger Z_E \beta^*$, $\mathbb{E}_{\beta^*}(\text{tr}[(\hat{\beta}_t - \hat{\beta})^T(\hat{\beta} - \beta^*)]) = \sigma_{\beta^*}^2 \text{tr}[(Z_E Z_E^T)(Z_P Z_P^T)^{-1}(\mathbf{I}_N - \alpha Z_P Z_P^T)^t]$ qui semble présenter un comportement de double descente en s'inspirant du $\text{tr}[(Z_E Z_E^T)(Z_P Z_P^T)^{-1}]$ de la section précédente.

7.2.2 Descente de gradient à pas variable

Dans la pratique, le pas de la descente de gradient n'est pas constant. C'est pourquoi nous allons généraliser les résultats précédents à la descente de gradient à pas variable.

La descente de gradient a pas variable est donnée par:

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha_t \nabla \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t})$$

Et donc : $\hat{\beta}_{t+1} = [I_P - \frac{2\alpha_t}{N} Z^T Z] \hat{\beta}_t + \frac{2\alpha_t}{N} Z^T Y$, on est dans le cas $u_{n+1} = a_n u_n + b_n$. Dans ce cas on a $u_n = [\prod_{k=0}^{n-1} a_k] u_0 + \sum_{k=0}^{n-1} [\prod_{i=k+1}^{n-1} a_i] b_k$.
D'où:

$$\hat{\beta}_t = \left[\prod_{k=0}^{t-1} \left(I_P - \frac{2\alpha_k}{N} Z^T Z \right) \right] \hat{\beta}_0 + \sum_{k=0}^{t-1} \left[\prod_{i=k+1}^{t-1} \left(I_P - \frac{2\alpha_i}{N} Z^T Z \right) \right] \frac{2\alpha_k}{N} Z^T Y$$

On suppose $\hat{\beta}_0 = 0$ et on pose $Z = U \Sigma V^T$ où $R = rg(Z)$, $\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_R & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$.

On va tenter de simplifier le problème en considérant un pas α_t constant par morceaux et cela permettra d'obtenir une forme explicite de l'erreur.

Théorème: Descente de gradient à pas constant par morceaux

On suppose que $\hat{\beta}_0 = 0$ et avec t_1, \dots, t_r changements de pas de descente de gradient. Alors, avec $t_{r+1} := t > t_r$:

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} \prod_{j=0}^r (I_R - \alpha_j' \Sigma_R^2)^{t_{j+1}-t_j} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y \quad (17)$$

Démonstration:

On suppose maintenant t_1, \dots, t_r changements de pas de descente de gradient. On a alors avec $t_0 = 0$ et $t_{r+1} = t - 1$: $\forall j \leq r, \forall t \in \llbracket t_j, t_{j+1} \rrbracket, \alpha_t' = \alpha_j'$.

Par récurrence à l'aide du théorème sur la descente de gradient simple, en utilisant les résultats 13 et 14. \square

Corollaire: Approximation par descente de gradient à pas variable

Dans le cas où $\hat{\beta}_0 = 0$ et $\max(\alpha_j') < \sigma_{\max}^{-2}$, en notant $t_{r+1} := t > t_r$ on a:

$$\sigma_{\max}^{-1} \prod_{j=0}^r (1 - \alpha_j' \sigma_{\max}^2)^{t_{j+1}-t_j} \|Y\|_2 \leq \|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2 \leq \sigma_{\min}^{-1} \prod_{j=0}^r (1 - \alpha_j' \sigma_{\min}^2)^{t_{j+1}-t_j} \|Y\|_2$$

Démonstration:

On prouve cette expression à l'aide des variations de la fonction $f(\sigma) = \sigma^{-1} \prod_{j=0}^r (1 - \gamma_j \sigma^2)^{\Delta t_j} = \sigma^{-1} g(\sigma)$, tel que $f(\sigma) \underset{\sigma \rightarrow 0}{\sim} 1 \backslash \sigma$, et tel que $f'(\sigma) = \frac{-g(\sigma)}{\sigma^2} [2 \sum_{j=0}^r \frac{\Delta t_j \gamma_j \sigma^2}{1 - \gamma_j \sigma^2} + 1] \underset{\sigma \rightarrow 0}{\sim} -1 \backslash \sigma^2$ et dont les points critiques sont les solutions de $\sum_{j=0}^r \gamma_j \sigma^2 \Delta t_j (1 - \gamma_j \sigma^2)^{-1} = -1 \backslash 2$ et les points $\sigma = \pm \gamma_j^{-1/2}$. Sous la condition $\max(\gamma_j) \leq \sigma_{\max}^{-2}$, la première équation n'a pas de solution et l'on se place dans la zone de décroissance de f, on peut donc se ramener

à la plus petite et la plus grande des valeurs singulière de Z en utilisant le théorème précédent et le lemme: $\sigma(A)_{min}\|X\|_2 \leq \|AX\|_2 \leq \sigma(A)_{max}\|X\|_2$ \square

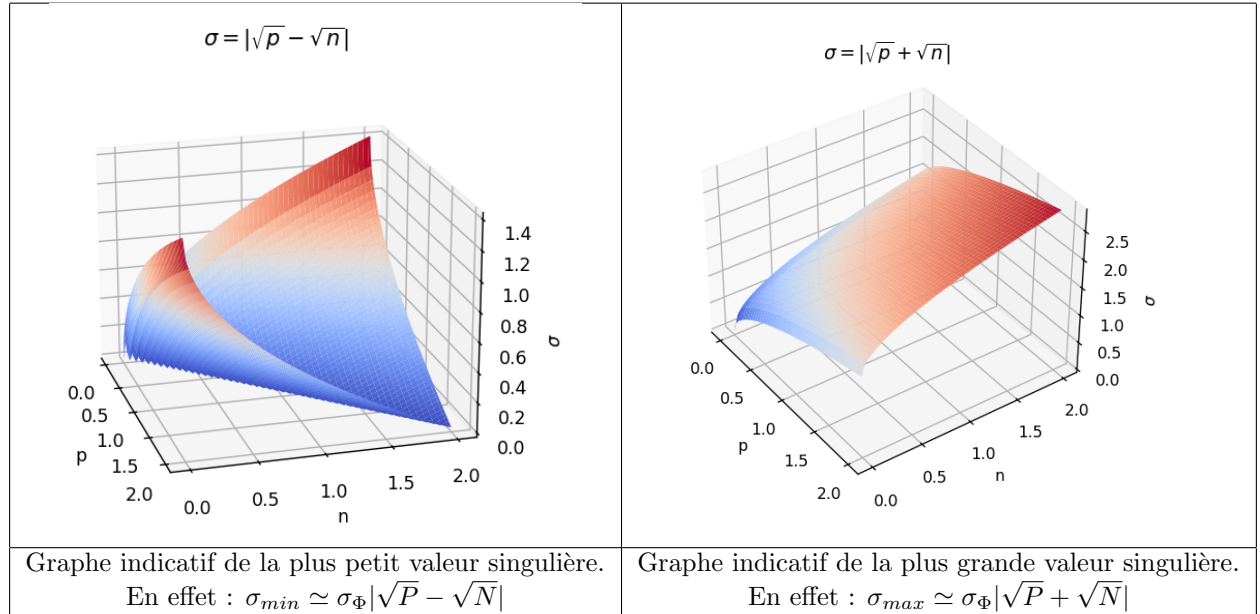
Ainsi, on a une erreur décroissante par rapport à t et σ . Donc σ_{min} ayant une courbe en U (voir section suivante) on a bien une courbe en U inversée pour l'erreur en fonction du quotient $P \setminus N$. Ainsi l'erreur apporté par la descente de gradient présente bien un apport au phénomène de double descente.

L'inégalité obtenue est optimal au sens que la seule inégalité utilisée dans la preuve est $\sigma(A)_{min}\|X\|_2 \leq \|AX\|_2 \leq \sigma(A)_{max}\|X\|_2$.

Ici, la condition sur le pas permet bien de faire tendre le pas vers 0.

7.2.3 Analyse de la plus petite et plus grande valeur singulière

Il est donc important d'étudier les valeurs singulières de la matrice Z pour comprendre l'impacte de la descente de gradient sur la double descente. Voici deux graphes qui illustrent les variations de ces valeurs singulière en fonction de P et de N .



"On the limit of the largest eigenvalue" [11] et "Marchenko–Pastur distribution" [7] pour $N \rightarrow +\infty$ et $P \setminus N \rightarrow \gamma$. Dans le cadre de notre base de features orthonormés, en notant $\mathbb{V}(\Phi_P(x)) = \sigma_\Phi^2$, on a alors $\sigma_{min} \simeq \sigma_\Phi |\sqrt{P} - \sqrt{N}|$ qui présente bien une courbe en U, et $\sigma_{max} \simeq \sigma_\Phi |\sqrt{P} + \sqrt{N}|$.

7.2.4 Descente de gradient stochastique

La descente de gradient stochastique sur les coordonnées du gradient est donnée par:

$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha_t D_t \nabla \hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}_t}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t})$$

où $J_t = \text{Diag}(\delta_{1,t} \cdots \delta_{P,t})$ et $\mathcal{D}_t \subset \mathcal{D}$. Ce sont des variables aléatoires. J_t permet de sélectionner des composantes du gradient à calculer et \mathcal{D}_t permet de calculer le gradient sur une partie de l'échantillon (batch). Or $\mathcal{D}_t \subset \mathcal{D}$, $\mathcal{D}_t = \{(x_{n_t(b)}, y_{n_t(b)}) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, b \in \llbracket 1, B \rrbracket\}$. Et $n_t : \llbracket 1, B \rrbracket \rightarrow \llbracket 1, N \rrbracket$ une injection. On peut alors poser $D_t := [\delta_{n_t(i),j}] \in \mathcal{M}_{B,N}(\mathbb{R})$.

On trouve alors $\hat{\beta}_{t+1} = [I_P - \alpha'_t J_t Z^T D_t^T D_t Z] \hat{\beta}_t + \alpha'_t J_t Z^T D_t^T D_t Y$.

On pose: $P_t := D_t^T D_t = \text{Diag}(\delta_{i \in \text{Im}(n_t)})$.

Théorème: Expression pour la descente de gradient stochastique

$$\hat{\beta}_t = \left[\prod_{k=0}^{t-1} (I_P - \alpha'_k J_k Z^T P_k Z) \right] \hat{\beta}_0 + \sum_{k=0}^{t-1} \left[\prod_{i=k+1}^{t-1} (I_P - \alpha'_i J_i Z^T P_i Z) \right] \alpha'_k J_k Z^T P_k Y$$

Ainsi en prenant $J \hookrightarrow \text{Diag}(\mathcal{U}(\llbracket 1, P \rrbracket))$ et $\mathcal{D}_t \hookrightarrow \mathcal{U}(\mathcal{D}^B)$, indépendantes deux à deux:

On a donc les mêmes résultats que précédemment, mais avec un facteur $\frac{1}{P}$ et $\frac{B}{N}$ et cette fois sur $\|\mathbb{E}_J(\hat{\beta}_t) - \hat{\beta}\|_2$.

$$\mathbb{E}_{\mathcal{D}, J}(\hat{\beta}_t) = \left[\prod_{k=0}^{t-1} (I_P - \alpha'_k \frac{B}{NP} Z^T Z) \right] \hat{\beta}_0 + \sum_{k=0}^{t-1} \left[\prod_{i=k+1}^{t-1} (I_P - \alpha'_i \frac{B}{NP} Z^T Z) \right] \alpha'_k \frac{B}{NP} Z^T Y$$

7.3 Expressions théorique sur les MLP

On rappelle que:

Définition: Modèle MLP

- $\hat{y}_\beta(x) = W_L \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ W_1(x)$, $W_l(x_l) = A_l x_l + b_l$ où $A_l \in \mathcal{M}_{S_l, E_l}(\mathbb{R})$ et $b_l \in \mathbb{R}^{S_l}$ tel que $S_l = E_{l+1}$
- $\sigma(x) = \max(0, x)$ fonction ReLU.
- On optimise $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}$ par descente de gradient (stochastique) selon le paramètre $\beta = \left[\begin{matrix} A_l \\ b_l \end{matrix} \right]_{l \in \llbracket 1, L \rrbracket}$.

Cas particulier: Dans le cas suivant, $\hat{y}_\beta(x) = W_2 \circ \sigma \circ W_1(x) = A_2 \sigma(A_1 x + b_1) + b_2$, $\hat{y}_\beta : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$.

$A_1 \in \mathcal{M}_{P, D}(\mathbb{R})$ et $A_2 \in \mathcal{M}_{1, P}(\mathbb{R})$. D'où avec : $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_\beta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_\beta(x_i) - y_i)^2$ et $\hat{y}_\beta(x) = \hat{A}_2 \sigma(\hat{A}_1 x + \hat{b}_1) + \hat{b}_2$ on a:

$$\text{Avec } \beta = \begin{bmatrix} A_1 \\ b_1 \\ A_2 \\ b_2 \end{bmatrix} \text{ on a } \nabla_\beta \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_\beta) = \begin{bmatrix} \nabla_{A_1} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_\beta) \\ \nabla_{b_1} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_\beta) \\ \nabla_{A_2} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_\beta) \\ \nabla_{b_2} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_\beta) \end{bmatrix} = \frac{2}{N} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^N x_i (\hat{A}_2 \odot \sigma'(\hat{A}_1 x_i + \hat{b}_1)^T) (\hat{y}_\beta(x_i) - y_i) \\ \sum_{i=1}^N (\hat{A}_2 \odot \sigma'(\hat{A}_1 x_i + \hat{b}_1)^T) (\hat{y}_\beta(x_i) - y_i) \\ \sum_{i=1}^N \sigma(\hat{A}_1 x_i + \hat{b}_1) (\hat{y}_\beta(x_i) - y_i) \\ \sum_{i=1}^N (\hat{y}_\beta(x_i) - y_i) \end{bmatrix}$$

Avec \odot le produit d'Hadamard.

Et on a : $\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha \nabla_\beta \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t})$. On comprend donc qu'il n'est pas aisé d'obtenir une expression manipulable analytiquement.

8 Conclusion

Ainsi, sous-notre conjecture, nous avons abouti dans le cadre d'un modèle linéaire dont les features sont orthonormés et dans le cadre du pseudo-inverse comme de la descente de gradient à montrer des éléments de double descente.

Il reste encore de nombreuses perspectives envisageables, comme tenter de prouver notre conjecture, étudier en détails la descente de gradient stochastique en étudiant l'espérance du risque et non le risque de l'espérance, explorer d'autres modèles comme le MLP.

Afin d'aller plus loin sur ce problème, ces cours peuvent être intéressants [10], [2]. Je tiens à remercier Samuel Gruffaz pour son aide très importante lors de ce stage, et Nicolas Vayatis qui nous a encadré.

9 Bibliographie

References

- [1] Francis Bach. “High-dimensional analysis of double descent for linear regression with random projections”. In: *SIAM Journal on Mathematics of Data Science* 6.1 (2024), pp. 26–50.
- [2] Francis Bach. *Learning Theory from First Principles*. https://www.di.ens.fr/~fbach/lftp_book.pdf. [Online]. 2024.
- [3] Mikhail Belkin, Daniel Hsu, and Ji Xu. “Two models of double descent for weak features”. In: *SIAM Journal on Mathematics of Data Science* 2.4 (2020), pp. 1167–1180.
- [4] Mikhail Belkin et al. “Reconciling modern machine-learning practice and the classical bias–variance trade-off”. In: *Proceedings of the National Academy of Sciences* 116.32 (2019), pp. 15849–15854.
- [5] Friedrich Götze and Alexander Tikhomirov. “Rate of convergence in probability to the Marchenko-Pastur law”. In: *Bernoulli* 10.3 (2004), pp. 503–548.
- [6] Emett Haddad. *Github Double Descente*. <https://github.com/EmettGabrielH/Double-descente---Emett-Haddad>. [Online]. 2024.
- [7] Ilja Kuzborskij et al. “On the role of optimization in double descent: A least squares study”. In: *Advances in Neural Information Processing Systems* 34 (2021), pp. 29567–29577.
- [8] Zhenyu Liao, Romain Couillet, and Michael W Mahoney. “A random matrix analysis of random fourier features: beyond the gaussian kernel, a precise phase transition, and the corresponding double descent”. In: *Advances in Neural Information Processing Systems* 33 (2020), pp. 13939–13950.
- [9] Rylan Schaeffer et al. “Double descent demystified: Identifying, interpreting & ablating the sources of a deep learning puzzle”. In: *arXiv preprint arXiv:2303.14151* (2023).
- [10] MM Wolf. *Mathematical foundations of supervised learning (growing lecture notes)*. <https://mediatum.ub.tum.de/doc/1723378/1723378.pdf>. 2018.
- [11] Yong-Qua Yin, Zhi-Dong Bai, and Pathak R Krishnaiah. “On the limit of the largest eigenvalue of the large dimensional sample covariance matrix”. In: *Probability theory and related fields* 78 (1988), pp. 509–521.

10 Appendices

10.1 Résultats expérimentaux

10.1.1 Régression polynomiale

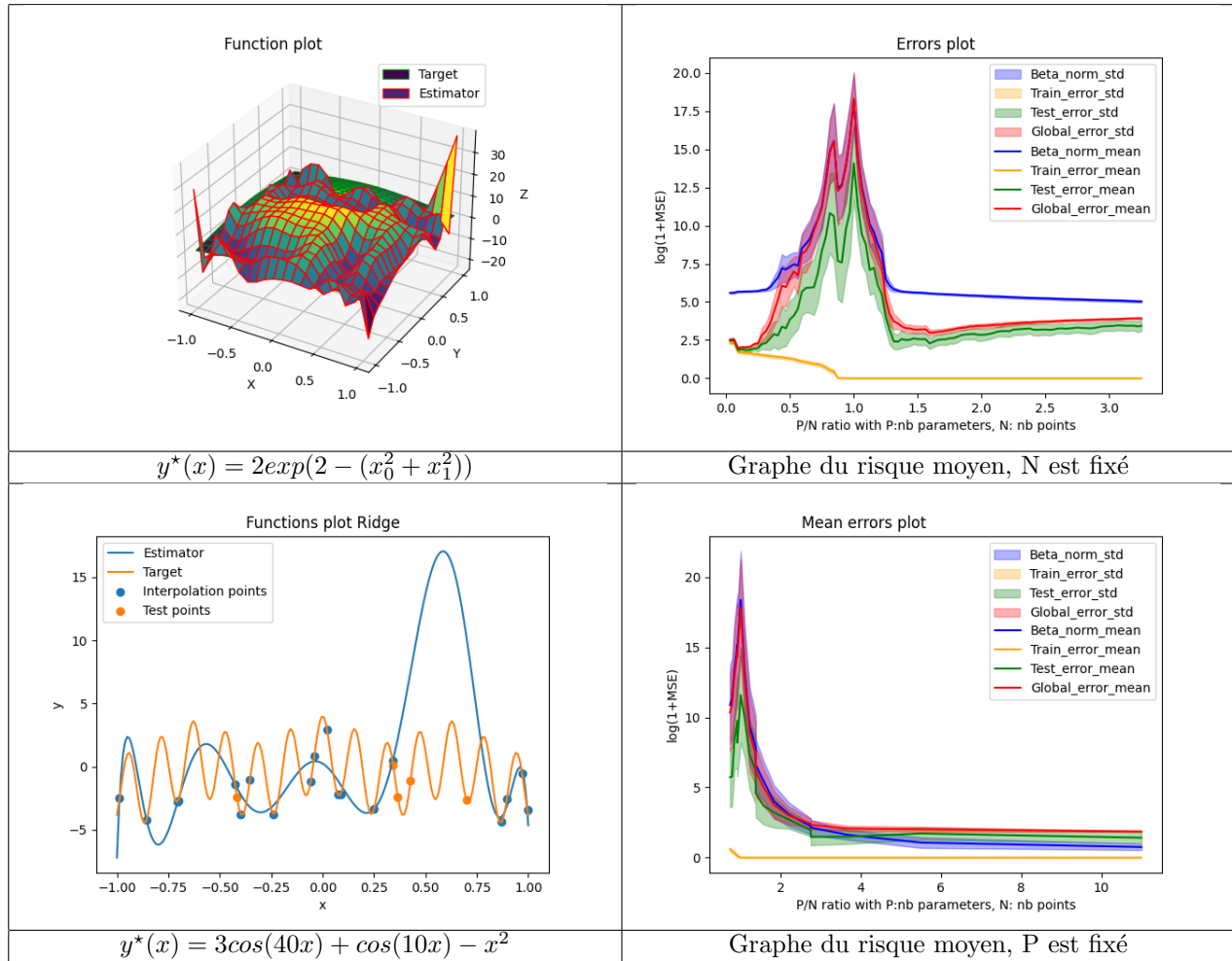


Figure 1: Résultats

On observe que le phénomène de double descente existe, que l'on commence par fixer N et faire varier P ensuite (premier exemple) ou le contraire, fixer P et faire varier N ensuite (deuxième exemple). Cependant, ce qui nous intéresse en pratique est bien de fixer l'échantillon \mathcal{D} et donc de fixer N et de faire varier P.

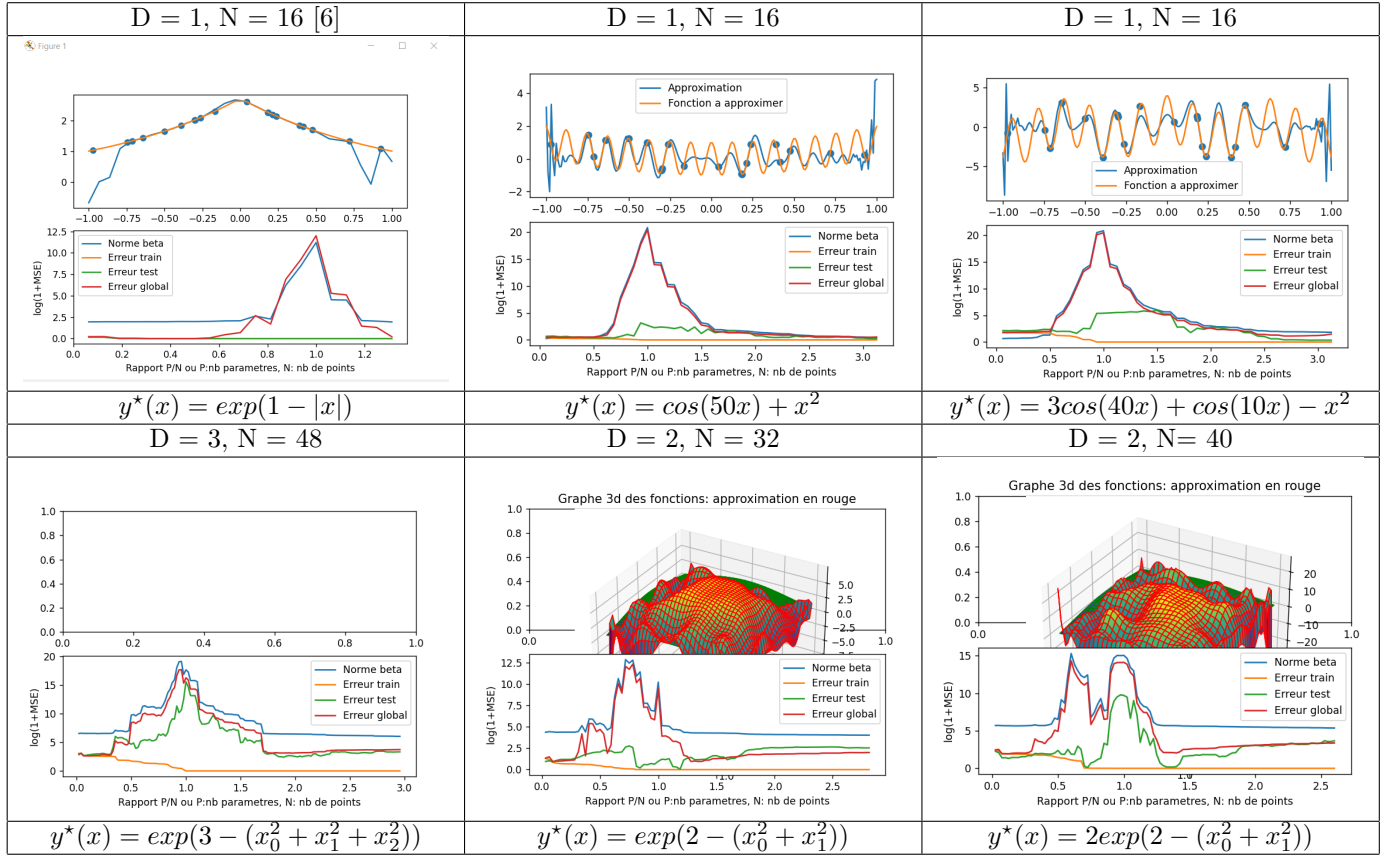


Figure 2: Phénomène de double descente en dimension 1, 2 et 3 pour des features polynomiales

On observe dans le cas de la régression polynomial simple (sans facteur de régulation) un phénomène de double descente, et ce quelque soit la dimension en entrée de la fonction cible.

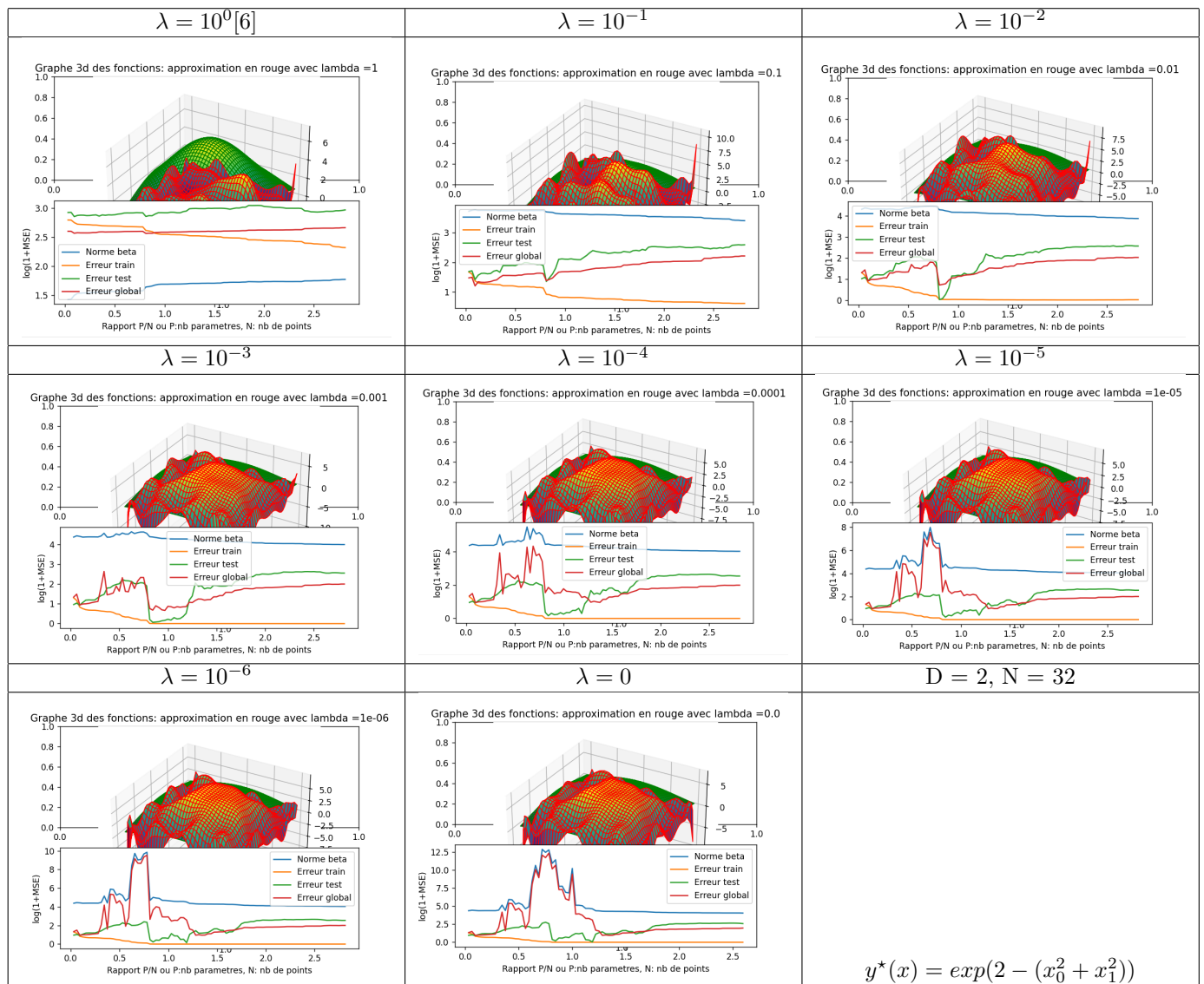


Figure 3: Influence d'un facteur de régulation sur l'apparition du phénomène de double descente.

On remarque que la régulation permet d'empêcher totalement la venue d'un phénomène de double descente par rapport au nombre de paramètre. En effet, on peut considérer que la réelle complexité réside dans la norme du paramètre β . Or, on a une descente simple par rapport à ce paramètre. D'où le résultat.

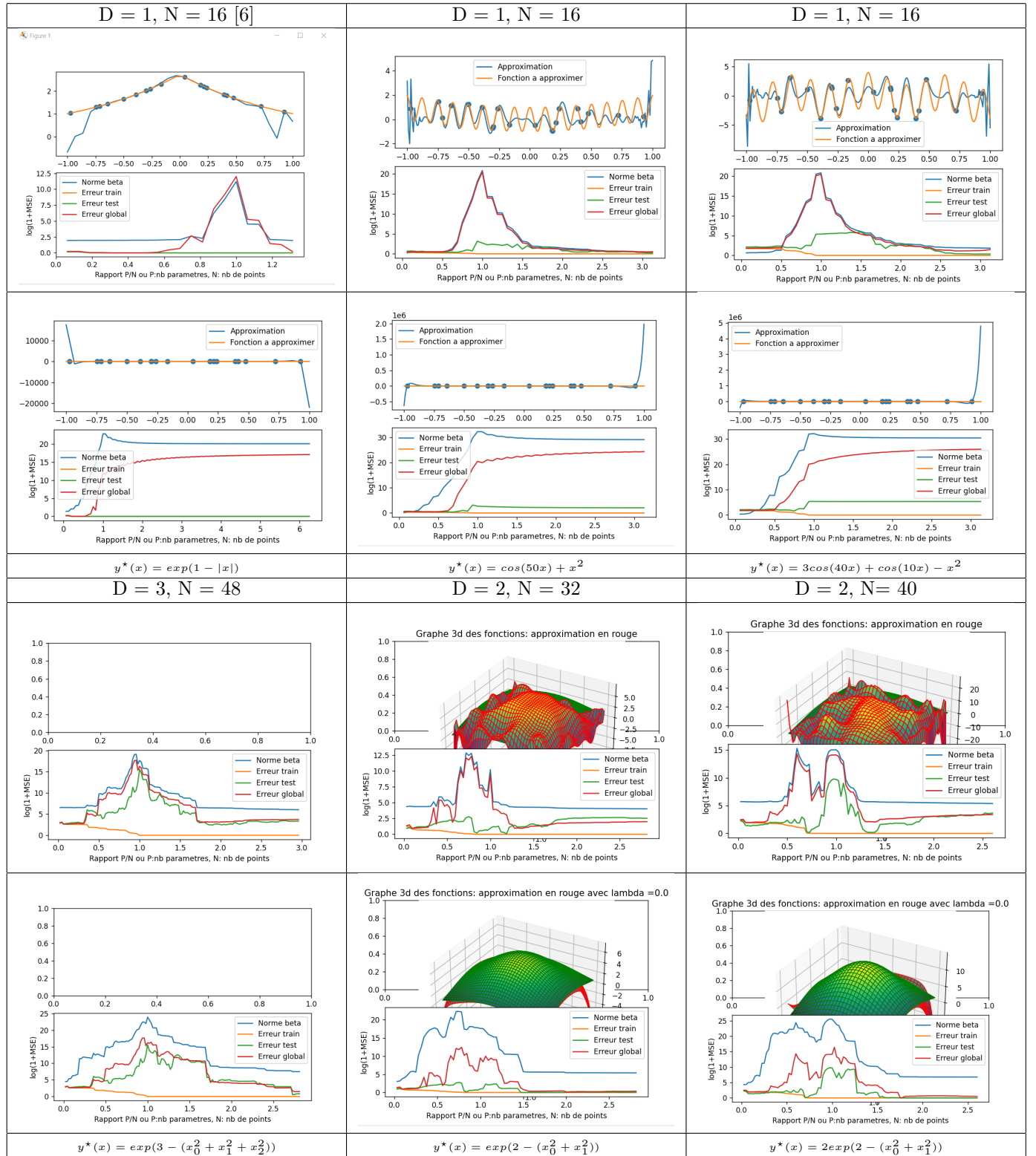


Figure 4: Influence du choix d'une base orthonormalisée/canonique sur la double descente

On remarque qu'orthonormaliser l'espace permet s'accélérer l'avenue du phénomène de double descente en faible dimension.

10.1.2 Multilayer Perceptron (MLP)

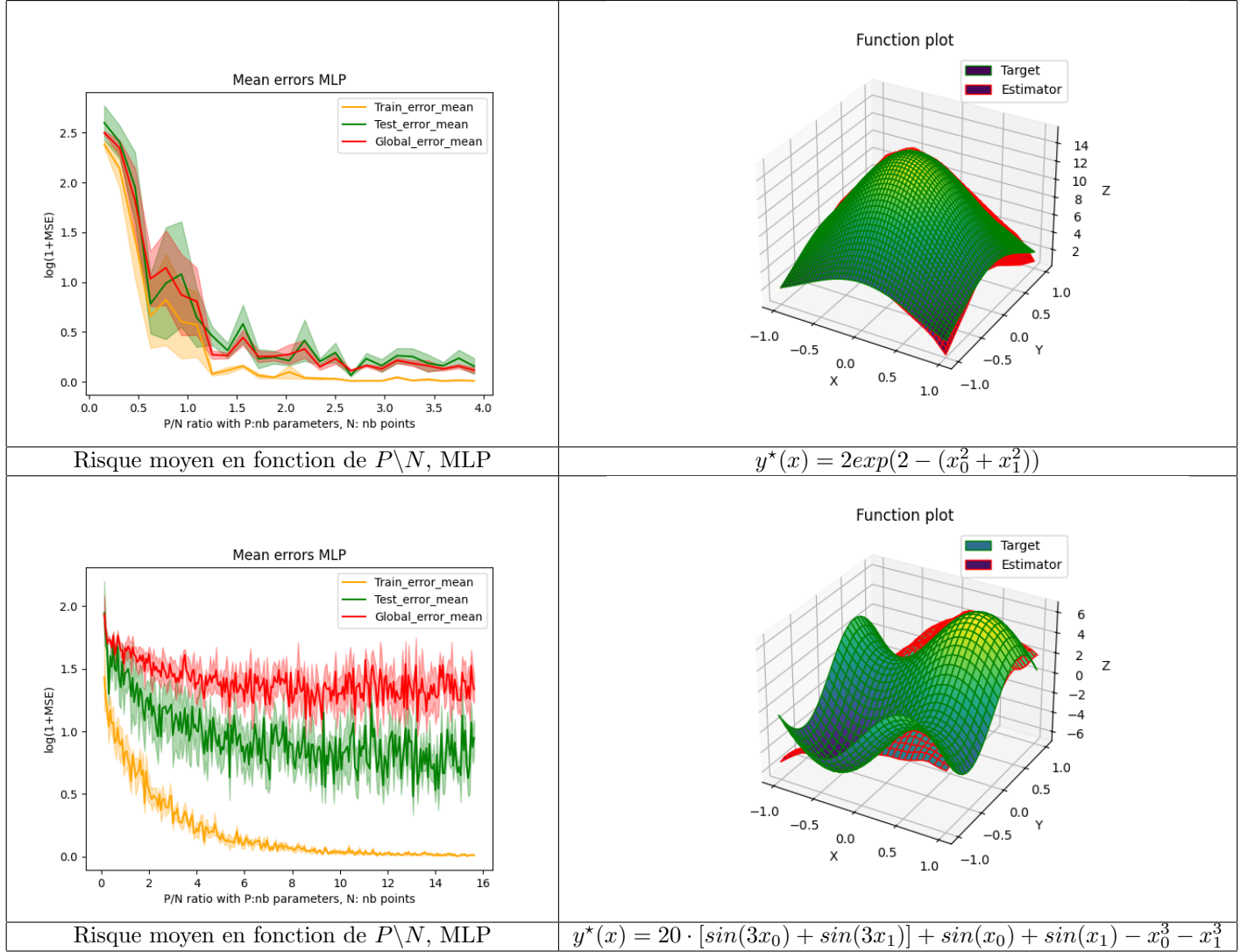


Figure 5: Graphe de la MSE d'un algorithme Multilayer Perceptron.

On peut constater avec le premier exemple qu'un phénomène de double descente peut apparaître en moyenne sur les MPL, cependant il peut aussi ne pas survenir, comme on peut le voir avec le deuxième exemple.

10.2 Détails numériques

De manière général, nous avons toujours utilisé $a = 1$ la taille du cube, $r = 0.2$ le ratio entre l'échantillon test/train. Et on utilise 23334 comme random seed par défaut.

Figure 1:

Exemple 1: Base orthonormée de degré homogène maximal $Deg = 13$. $n = 20$, $M = 40$, $Lambda = 0$,
 Liste_seeds = [1000,12334,13902,29389,1233983,18938309,22387928,37289749,232382,42,3297].

Exemple 2: Base orthonormée de degré homogène maximal $Deg = 10$. $M_{min} = 2$, $M_{max} = 20$, $n = 200$ $Lambda = 0$

Liste_seeds = [1000,12334,13902,29389,1233983,18938309,22387928,37289749,232382,42,3297, 567547,378647,44478,287974,37846

Figure 2: Ici, on considère une base orthonormée de degré homogène maximal Deg .

Exemple 1: $M = 20, n = 30, \text{Deg} = 50$ — Exemple 2: $M = 20, n = 200, \text{Deg} = 50$
 Exemple 3: $M = 20, n = 200, \text{Deg} = 50$ — Exemple 4: $M = 60, n = 30, \text{Deg} = 8$
 Exemple 5: $M = 40, n = 40, \text{Deg} = 12$ — Exemple 6: $M = 50, n = 60, \text{Deg} = 13$

Figure 3: Ici, on réutilise l'exemple 5 ($M = 40, n = 40, \text{Deg} = 12$) mais avec λ facteur de régulation qui varie entre 1 et 0, en utilisant l'algorithme 3.

Figure 4: Même entrées que pour 2 mais on compare base orthonormée et base canonique.

Figure 5: (MLP)

Exemple 1: $n = 100, M = 40, \text{Epochs} = 10000, \alpha = 10^{-3}, P_{\min} = 1, P_{\max} = 25,$
 Liste_seeds = [1000,12334,13902,29389]
 Exemple 2: $n = 30, M = 20, \text{Epochs} = 5000, \alpha = 10^{-4}, P_{\min} = 2, P_{\max} = 250$
 Liste_seeds = [1000,1001,1020,1234,1984]

10.3 Pseudo-code

10.3.1 Modèle linéaire et pénalisé

Cf: <https://ipolcore.ipol.im/demo/clientApp/demo.html?id=77777000515>

Algorithm 1: Generation of the orthonormal polynomial basis (Gram- Schmidt)

```

1 function generate_orthonormal_basis( $D, D', C$ )
  Input  $D, D', C$ :  $D \in \mathbb{N}^*, D' \in \mathbb{N}^*, C \subset \mathbb{R}^D$ 
2   $\text{Basis}_{D'} = [\Pi_{d=1}^D X_d^{\alpha_d}, \sum \alpha_d \leq D']$ 
3   $P = \text{LENGHT}(\text{Basis}_{D'})$ 
4  for  $1 \leq p \leq P$  do
5     $f'_p = \text{Basis}_{D'}[p] - \sum_{i=1}^{p-1} [\int_C \text{Basis\_ortho}_{D'}[i] \cdot \text{Basis}_{D'}[i]] \times \text{Basis\_ortho}_{D'}[i]$ 
6     $\text{Basis\_ortho}_{D'}[p] = \frac{f'_p}{\|f'_p\|_2}$ 
7  return  $\text{Basis\_ortho}_{D'}$ 
```

Algorithm 2: Dataset initialisation

```

1 function dataset_initialisation( $f, C, M, \text{ratio\_data}$ )
  Input  $y, C, M, \text{ratio\_data}$ :  $y : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}, C = [[a_d, b_d], 1 \leq d \leq D], \text{ratio\_data} \in [0, 1]$ 
2   $U = \mathcal{U}([0, 1]^{(M,D)})$ 
3   $X = \text{Diag}(a_d) + U \text{Diag}(b_d - a_d) \# X \hookrightarrow \mathcal{U}(C^M)$ 
4   $Y = y(X)$ 
5   $X_{\text{train}}, X_{\text{test}}, Y_{\text{train}}, Y_{\text{test}} = \text{test\_split}(X, Y, \text{ratio\_data})$ 
6  return  $X_{\text{train}}, X_{\text{test}}, Y_{\text{train}}, Y_{\text{test}}$ 
```

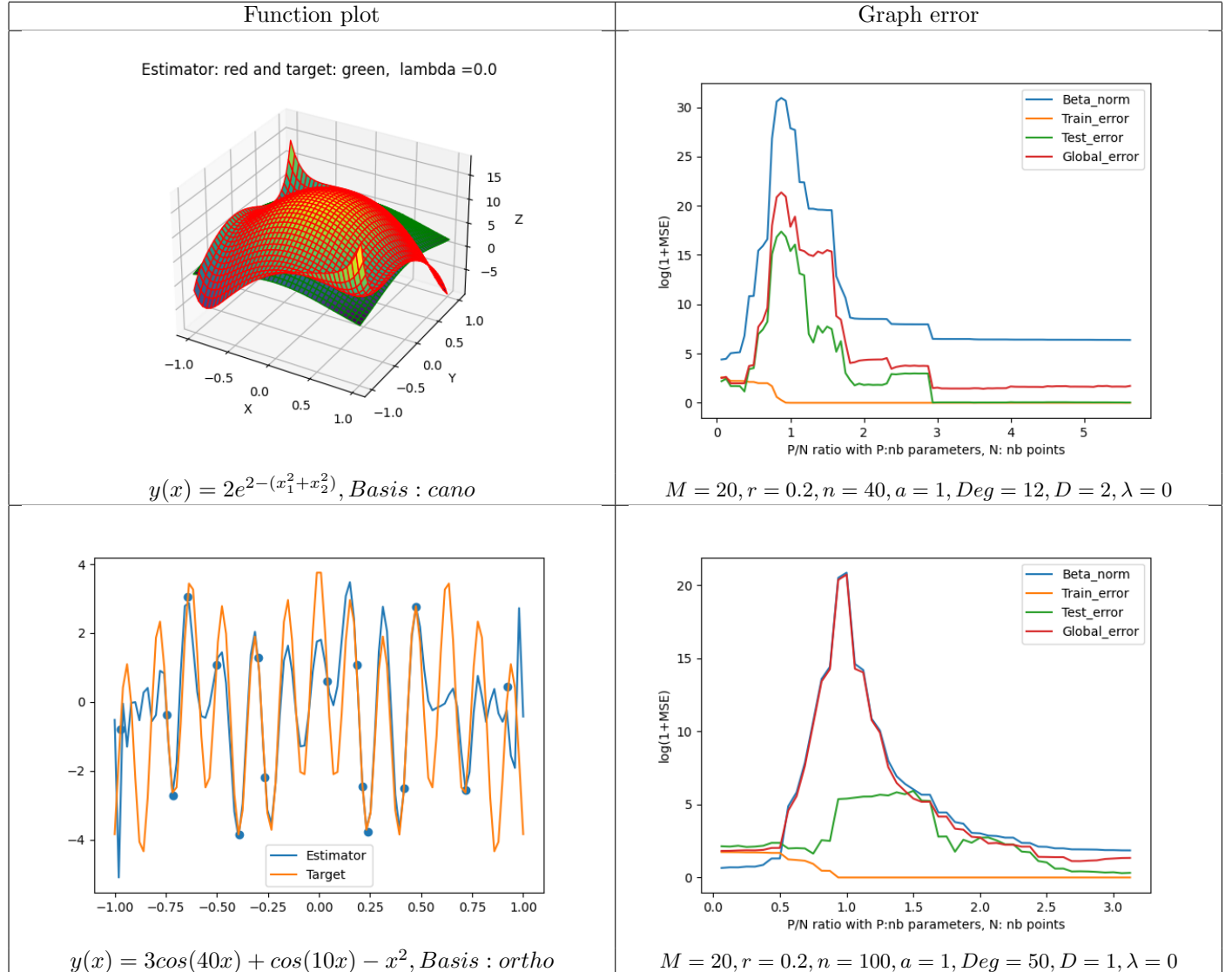
Algorithm 3: Ridge Regression

```

1 function ridge_regression( $P_{\min}, P_{\max}, \text{Features}, \lambda, \text{Data}, \text{Data\_global}$ )
2    $X_{\text{train}}, X_{\text{test}}, Y_{\text{train}}, Y_{\text{test}} = \text{Data}$ 
3    $X_{\text{global}}, Y_{\text{global}} = \text{Data\_global}$ 
4   for  $P_{\min} \leq p \leq P_{\max}$  do
5      $\Phi_p = [f_p, 1 \leq p \leq P]^T$  # ( $f_p$ ) an orthonormal basis for p.s. on  $C$ 
6      $Z_p = \Phi_p^T(X_{\text{train}})$  #  $Z_p \in \mathcal{M}_{N,P}(\mathbb{R})$ 
7      $\hat{\beta}_p = \begin{bmatrix} Z_p \\ \sqrt{N\lambda}I_p \end{bmatrix}^\dagger \begin{bmatrix} Y_{\text{train}} \\ O_p \end{bmatrix}$ 
8     Train_error[p] =  $\log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{train}}, Z_p\hat{\beta}_p))$ 
9     Test_error[p] =  $\log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{test}}, \Phi_p^T(X_{\text{test}})\hat{\beta}_p))$ 
10    Global_error[p] =  $\log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{global}}, \Phi_p^T(X_{\text{global}})\hat{\beta}_p))$ 
11    Beta_norm[p] =  $\log(1 + \|\hat{\beta}_p\|_2^2)$ 
12   $\hat{y} = \Phi_p \cdot \hat{\beta}_{P_{\max}}$ 
13  return Train_error, Test_error, Beta_norm, Global_error,  $\hat{y}$ 

```

Examples: (random seed : 23334)



10.3.2 Modèle MLP

Cf : <https://ipolcore.ipol.im/demo/clientApp/demo.html?id=77777000527>

Algorithm 4: MLP Gradient Descent

```
1 function MLP_Gradient_Descent( $P_{\min}, P_{\max}, \text{Epochs}, \alpha, \text{Data}, \text{Data\_global}$ )
2    $X_{\text{train}}, X_{\text{test}}, Y_{\text{train}}, Y_{\text{test}} = \text{Data}$ 
3    $X_{\text{global}}, Y_{\text{global}} = \text{Data\_global}$ 
4   for  $P_{\min} \leq p \leq P_{\max}$  do
5      $MLP = \text{Affine}(1, P) \circ \sigma \circ \text{Affine}(P, D)$  # Creation of the MLP structure
6      $MLP.\text{fit}(X_{\text{train}}, Y_{\text{train}}, \text{Epochs}, \alpha)$ 
7      $\text{Train\_error}[p] = \log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{train}}, MLP(X_{\text{train}})))$ 
8      $\text{Test\_error}[p] = \log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{test}}, MLP(X_{\text{test}})))$ 
9      $\text{Global\_error}[p] = \log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{test}}, MLP(X_{\text{global}})))$ 
10   $\hat{y} = MLP(P_{\max})$ 
11  return  $\text{Train\_error}, \text{Test\_error}, \text{Global\_error}, \hat{y}$ 
```

Algorithm 5: MLP Gradient Descent FIT

```
1 function MLP_fit( $X_{\text{train}}, Y_{\text{train}}, \text{Epochs}, \alpha$ )
2   for  $1 \leq \text{epoch} \leq \text{Epochs}$  do
3     for  $(x_{\text{train}}, y_{\text{train}}) \in \mathcal{D}$  do
4        $\text{score\_gradient} = MLP(x_{\text{train}}) - y_{\text{train}}$  # gradient of MSE
5        $\text{backpropagation}(\text{score\_gradient})$ 
6      $\text{update}(\alpha)$  # update weights
```

