

Rapport - Double Descente - Emett Haddad

Emett Haddad, Encadrants: Nicolas Vayatis, Samuel Gruffaz

20/06/2024

Contents

1	Présentation du problème	1
2	Régimes et Double Descente	2
3	Modèles	3
3.1	Modèle par MLP: (Multi Layer Perceptron)	3
3.2	Modèle linéaire	3
3.3	Modèle linéaire pénalisé (Ridge Regression)	3
4	Etat de l'art	4
5	Focus techniques	4
5.1	Théorèmes de Belkin et al.	4
5.2	Théorème de Kuzborskij et al.	5
5.3	Théorème de Francis Bach	5
6	Résultats théoriques	6
6.1	Régression linéaire	6
6.2	Minimisation par descente de gradient	10
6.2.1	Descente de gradient simple	10
6.2.2	Descente de gradient à pas variable	12
6.2.3	Analyse de la plus petite et plus grande valeur singulière	13
6.2.4	Descente de gradient stochastique	13
6.3	Expressions théorique sur les MLP	14
7	Résultats expérimentaux	14
7.1	Régression polynomial	14
7.2	Multilayer Perceptron (MLP)	19
8	Détails numériques	19
9	Appendices	20
9.1	Pseudo-code	21
9.1.1	Modèle linéaire et pénalisé	21
9.1.2	Modèle MLP	22

1 Présentation du problème

Un cours expliquant ce problème : [8]

Définition: Fonction cible

On souhaite approximer une fonction y^* avec x et y des variables aléatoires.
 $y^* : x' \in \mathcal{X} = \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{E}_{(x,y) \sim \mathcal{P}}(y|x = x') \in \mathcal{Y} = \mathbb{R}$

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 $y_n := y(x_n)$. On modélise ici : $y = y^* + \epsilon$ où ϵ représente le bruit tel que $\mathbb{E}(\epsilon|x) = 0$, et $\mathbb{V}(\epsilon) = \sigma^2$.

Définition: Estimateur

- On veut trouver déterminer un **estimateur** $\hat{y}_{\hat{\beta}} : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{Y}$ tel que $\hat{y}_{\hat{\beta}} \approx y$ (au sens du risque ci-dessous).
- $\hat{y}_{\hat{\beta}} \in \mathcal{H}$ 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[8] 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: $\forall \hat{y} \in \mathcal{H}$

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

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

$$\mathcal{E}(\hat{y}) = \mathcal{R}(\hat{y}) - \mathcal{R}(y^*) \quad (2)$$

2 Régimes et Double Descente

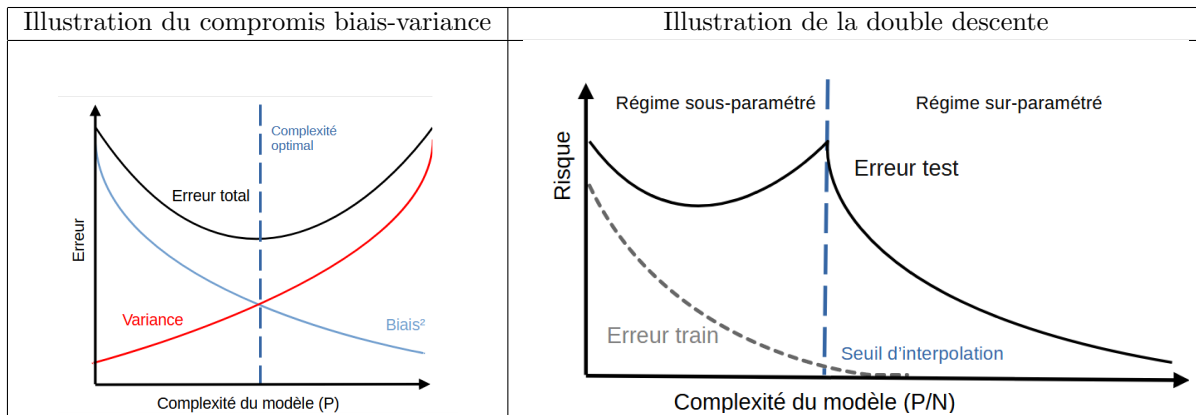
Notions de régimes:

- **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[3].



3 Modèles

3.1 Modèle par MLP: (Multi Layer Perceptron)

Définition: Modèle MLP

- $\hat{y}_{\hat{\beta}}(x) = W_L \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ W_1(x)$, $W_l(x_l) = A_l x_l + b_l$ 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.
- Par descente de gradient (stochastique) sur $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}$ selon les paramètres A_l, b_l .

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

3.2 Modèle linéaire

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 $Z = [\Phi_P(x_1), \dots, \Phi_P(x_N)]^T = [f_j(x_i)] \in \mathcal{M}_{N,P}(\mathbb{R})$
- $\forall x \in \mathcal{X}$, $\hat{y}_{\hat{\beta}}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$, pour $\hat{\beta} = Z^\dagger Y$ avec Z^\dagger le pseudo-inverse de Z.
- Risque empirique $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \frac{1}{N} \|Y - Z\hat{\beta}\|_2^2$
- Modèle simple $f_i(x) = e_i(x)$ et $X = Z$

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:

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

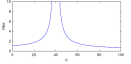
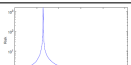
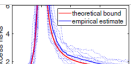

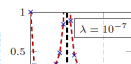
où $J_t = \text{Diag}(\delta_{1,t} \dots \delta_{P,t})$ et $\mathcal{D}_t \in \mathcal{D}^B$. Ce sont des variables aléatoires. J_t représente le fait qu'on ne calcule qu'une partie du gradient, et \mathcal{D}_t représente les batchs de taille B, on ne calcule le gradient que sur un sous-ensemble de l'échantillon.

3.3 Modèle linéaire pénalisé (Ridge Regression)

Définition: Modèle linéaire pénalisé

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

4 Etat de l'art

	Features/Modèle	Résultats	Méthodes	Graphe
Belkin et al. [2]	$f_p(x) = e_{i_p}(x)$, coordonnées aléatoires	Expression du vrai risque, non-asymptotique	Inverse de Wishart	
Belkin et al. [2]	$f_p(\omega) = \omega^{i_p}$ sur le cercle complexe Racine de l'unité aléatoires pour l'échantillon \mathcal{D}	Équivalent du vrai risque, asymptotique	Transformée de Stieltjes	
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	
Kuzborskij et al. [5]	$f_p(x) = e_p(x)$ Descente de gradient et non pseudo-inverse	Majoration du vrai risque non-asymptotique	Inégalité de concentration	
Zhenyu et al. [6]	$f_p(x) = \cos((v_p, x))$ ou sin, pseudo-inverse	Limite MSE, asymptotique	Étude de la résolvante	

5 Focus techniques

5.1 Théorèmes de Belkin et al.

Théorème: Belkin et al.- base canonique [2]

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 $P < N - 1$:

$$\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = [(1 - \frac{P}{E})\|\beta^*\|^2 + \sigma^2](1 + \frac{P}{N-P-1})$$
- Si $P > N + 1$:

$$\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \|\beta^*\|^2[1 - \frac{N}{E}(2 - \frac{E-N-1}{P-N-1})] + \sigma^2(1 + \frac{N}{P-N-1})$$
- Sinon:

$$\mathcal{R}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = +\infty$$

Éléments de preuve:

La preuve se déroule en plusieurs étapes: On note e_p indice une extraction sur les lignes. On commence par poser $T \in [1, D]^P$ 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 $\eta = Y - X_T \beta_T^*$

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

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

$\mathbb{E}(\|X_T^T(X_T X_T^T)^\dagger \eta\|_2^2) = (\|\beta_{T^c}^*\|_2^2 + \sigma^2) \text{tr}[\mathbb{E}((X_T X_T^T)^\dagger)]$ # On reconnaît l'inverse de Wishart Enfin on passe à l'espérance sur T . Et on a le résultat attendu. \square

5.2 Théorème de Kuzborskij et al.

Théorème: Kuzborskij et al[5] 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 suppose ici $\sqrt{D} - \sqrt{N} - 1 > 0$, dans le cadre du modèle linéaire simple, en se plaçant dans l'hypothèse isotropique et sub-gaussienne.

$$\mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}_T}) \lesssim \left[\left(1 - \frac{2\alpha}{N} (\sqrt{D} - \sqrt{N} - 1)^2 \right)^{2T} + \frac{1}{\sqrt{N}} \right] \|\beta^*\|^2 \quad (3)$$

Remarque:

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

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

5.3 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 pose aussi $y(x) = x^T S \beta^* + \epsilon$. 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 $\hat{\mathcal{R}}_\Sigma^{(biais)}$ pour $\epsilon = 0$, et sous certaines hypothèses (vecteurs sub-Gaussiens iid et quelques convergences) tel que $N \rightarrow +\infty$ et $\frac{P}{N} \rightarrow \gamma$.

- Si $\gamma < 1$:

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

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

- Si $\gamma > 1$:

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

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

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 passe par 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 $\hat{\beta} = (\hat{\Sigma} + \lambda I_D)^{-1} \hat{\Sigma} S \beta^* + \frac{1}{N} (\hat{\Sigma} + \lambda I_D)^{-1} X^T \epsilon$. Ensuite on passe de $\hat{\Sigma}$ à Σ par des propriétés de la transformée de Stiejes. \square

Remarque:

Application au modèle isotrope: On a $\Sigma = I_D$, alors ...

6 Résultats théoriques

6.1 Régression linéaire

On considère: $\Phi_P(x) = [f_1(x), \dots, f_P(x)]^T$ où $f_p : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ et $\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$. On considère ici des fonctions de "moyenne" nulle i.e. $\forall p \geq 1, \mathbb{E}_x(f_p(x)) = 0$.

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 $\forall z \in \mathbb{C}, G_P^x(z) = \sum_{p=1}^P f_p(x)z^p$.

Théorème: Expressions de l'estimateur

Avec $\mathcal{F} := \{f_i, i \in \mathbb{N}\}$, pour $\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x)\hat{\beta}$ on a:

$$\forall x \in \mathcal{X}, \hat{y}(x) = [f_1(x), \dots, f_P(x)][(f_i, f_j)_X]^\dagger \begin{bmatrix} (f_1, y)_X \\ \vdots \\ (f_P, y)_X \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\forall x \in \mathcal{X}, \hat{y}(x) = ([\{G_P^{x_i}, G_P^{x_j}\}]^\dagger [\{G_P^{x_i}, G_P^{x_j}\}])^T Y \quad (5)$$

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 :

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

□

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:

En effet, en supposant $rg(Z_P) = N$, nous avons ce résultat par l'étude du Lagrangien [7]. On note ici Z_P la matrice Z avec P features. Le vecteur $\hat{\beta}_P$ est un minimum global pour la norme euclidienne dans l'espace affine $\hat{\beta}_P + \text{Ker}(Z_P) = \{\beta, Y = Z_P\beta\}$ car avec:

$$\forall \beta \in \mathbb{R}^P, \forall \gamma \in \mathbb{R}^N \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = \|\beta\|_2^2 + \gamma^T (Y - Z_P\beta) \quad (6)$$

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 APCR 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 rappelle $Z_P = \Phi_P^T(X)$, $Z_{PC} = \Phi_{PC}^T(X)$, $Z_E = [Z_P, Z_{PC}] = \Phi_E^T(X)$.

Théorème: Expression de l'excès de risque renormalisé

On pose $\Phi_E(x) = \begin{bmatrix} \Phi_P(x) \\ \Phi_{PC}(x) \end{bmatrix}$ 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 orthonormées. On note $\mathbb{E}(\Phi_E(x)\Phi_E(x)^T) = \sigma_\Phi^2 I_E$.

On a alors:

$$\sigma_\Phi^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}, \beta^*) = \|\hat{\beta} - \beta^*\|^2 = \|\beta^*\|^2 + \|Z_P^\dagger Z_{PC} \beta_{PC}^*\|^2 - \text{tr}[(Z_P^\dagger Z_P) \beta_P^* \beta_P^{*T}] \quad (7)$$

Démonstration:

On s'inspire de la preuve de Belkin et al [2]. On note de même β_P pour parler de P composante de β , de même pour les vecteurs colonnes des matrices. On note β_{PC} pour les autres composantes.

$\mathcal{R}(\hat{y}) = \mathbb{E}_P((y - \hat{y}(x))^2) = \mathbb{E}_P((y - y^*(x) + y^*(x) - \hat{y}(x))^2) = \mathcal{R}(y^*) + \mathbb{E}_P((y^*(x) - \hat{y}(x))^2)$ car $\mathbb{E}(y - y^*(x)|x) = 0$ par hypothèse sur le bruit.

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

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

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

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

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

□

Remarque:

Dans le cas d'une base orthonormée sur un cube I, avec x suivant une loi uniforme, on a $\mathbb{E}_{x \sim \mathcal{U}(I)}(f_i(x)f_j(x)) = \sigma_\Phi^2 \delta_{i,j}$. Ainsi on a bien: $\mathbb{E}_x(\Phi_E(x)\Phi_E(x)^T) = \sigma_\Phi^2 I_E$.

De plus on fixe $f_0 := \tilde{1}$ et $\forall p \geq 1$, $\mathbb{E}_x(f_p(x)) = \mathbb{E}_x(f_0(x)f_p(x)) = 0$. On a alors $\mathbb{E}(\Phi_P(x)) = 0$. Ainsi, en posant $z_i = \mathbb{E}(\Phi_P(x_i)) \in \mathbb{R}^P$ on a les z_i sont indépendants par lemme de coalition, et de moyenne nulle, et même variance, on est donc dans le contexte de "Marchenko–Pastur distribution".

Corollaire: Expression de l'excès de risque

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

$$(\sigma_\Phi \sigma_{\beta^*})^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = E - 2rg(Z_P) + \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \quad (8)$$

Démonstration:

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

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

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

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

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

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

□

Conjecture. Expression de l'excès de risque asymptotique, cas du rang maximal (conjecture expérimental)
 En supposant : $\mathbb{E}(\beta^* \beta^{*T}) = \frac{\|\beta^*\|^2}{E} I_E$, $\text{rg}(Z_P) = \min(P, N)$, et (f_1, \dots, f_P) features orthonormées de moyenne nul.

$$\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) := \lim_{N \rightarrow +\infty, \frac{P}{N} \rightarrow \gamma, \frac{E}{N} \rightarrow \delta} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \sigma_{\Phi}^2 \left[1 - 2 \frac{\min(\gamma, 1)}{\delta} + \frac{\min(\gamma, 1)}{\delta} \left| \frac{1 - \delta}{1 - \gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|^2 \quad (9)$$

Preuve:

On se place dans le cadre $\|\beta^*\|^2 = \text{tr}(\beta^* \beta^{*T}) = \text{constante}$ et $\text{rg}(Z) = \min(N, P)$. Ce choix vient du fait que l'erreur aléatoire sur les termes du développement en série diminue lorsque l'on prend plus de termes, et que l'ensemble des fonctions à approximer est tel que $\mathbb{E}(\beta^*) = 0$. On fixe $\mathbb{V}(\beta_i^*) = \sigma_{\beta^*}^2$. D'où $\sigma_{\beta^*}^2 = \frac{\|\beta^*\|^2}{E}$ et ainsi on fait ensuite la limite $E, P, N \rightarrow +\infty$, avec $\frac{E}{N} \rightarrow \delta$ et $\frac{P}{N} \rightarrow \gamma$.

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

- Régime sous-paramétré:

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) &= \left[1 - \frac{2P}{E} + \frac{P}{E} \frac{1}{P} \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \right] \cdot \|\beta^*\|^2 \\ \mathcal{E}(\hat{y}) &\sim \sigma_{\Phi}^2 \left[1 - 2 \frac{\gamma}{\delta} + \frac{\gamma}{\delta} \left| \frac{1 - \delta}{1 - \gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|^2 \end{aligned}$$

- Régime sur-paramétré:

$$\begin{aligned} \sigma_{\Phi}^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) &= \left[1 - \frac{2N}{E} + \frac{N}{E} \frac{1}{N} \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \right] \cdot \|\beta^*\|^2 \\ \mathcal{E}(\hat{y}) &\sim \sigma_{\Phi}^2 \left[1 - 2 \frac{1}{\delta} + \frac{1}{\delta} \left| \frac{1 - \delta}{1 - \gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|^2 \end{aligned}$$

Pour tenter de prouver cela on pourrait tenter d'utiliser: Utiliser le lemme de Francis Bach page 8.

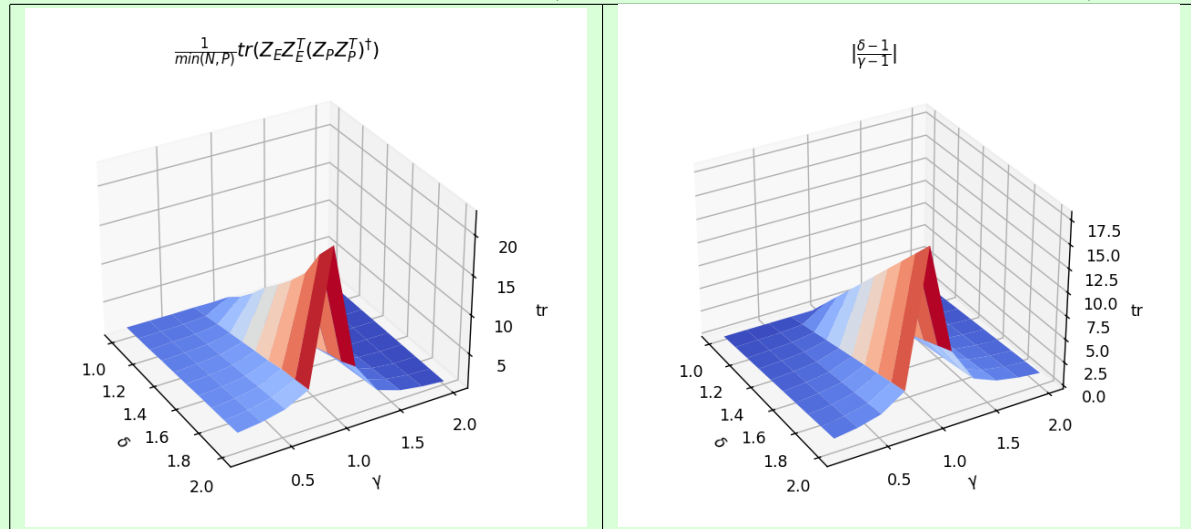
On a $\text{tr}(A(\hat{\Sigma} + \lambda I)^{-1}) \sim \frac{\kappa(\lambda)}{\lambda} \text{tr}(A(\Sigma + \kappa(\lambda)I)^{-1})$ et faire $\lambda \rightarrow 0$. Pour $\gamma < 1$ cela donne $\text{tr}(A\hat{\Sigma}^{-1}) \sim \frac{1}{1 - \gamma} \text{tr}(A\Sigma^{-1})$.

Pour $\gamma > 1$ cela donne $\text{tr}(A\hat{\Sigma}^{-1}) \sim \frac{1}{\gamma - 1} \text{tr}(A(\Sigma + \sigma^2(\gamma - 1)I)^{-1})$

Et on peut aussi tenter d'utiliser la "distribution de Marchenko-Pastur" sur $\frac{1}{N} Z_P Z_P^T$. □

Remarque:

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

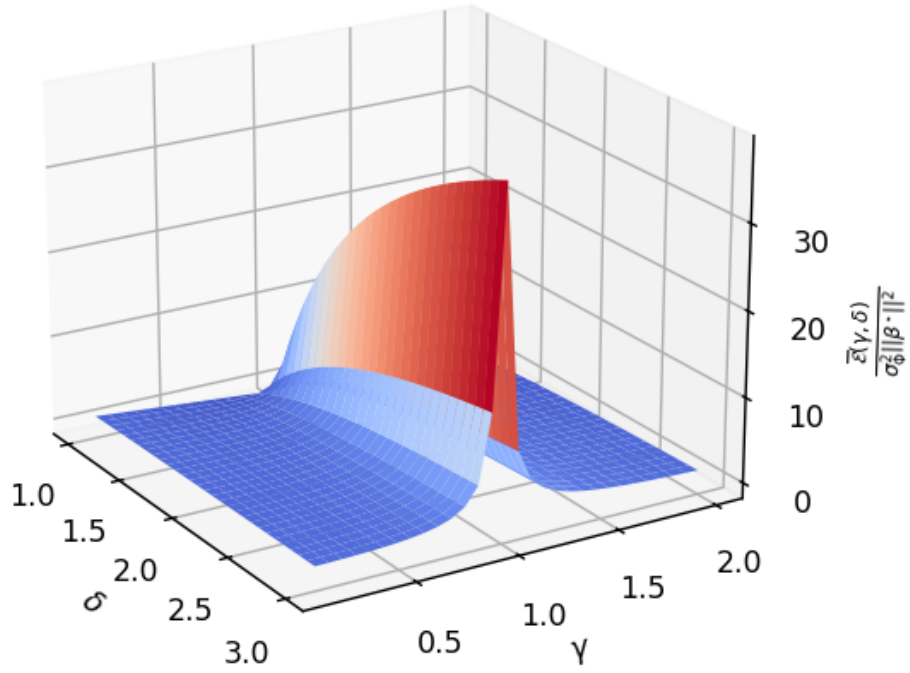


Remarque:

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

On a donc avec cette conjecture un risque asymptotique moyen qui présente cette forme:

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



6.2 Minimisation par descente de gradient

Remarque:

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

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

On peut donc s'intéresser au terme d'erreur apporté par la descente de gradient, par rapport à la solution du pseudo-inverse.

6.2.1 Descente de gradient simple

La descente de gradient a 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:

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

On a :

$$\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T [\hat{\beta}_0 - \hat{\beta}] \quad (10)$$

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

$$\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = -V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y \quad (11)$$

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:

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

En notant $V = [v_1, \dots, v_P]$ on a alors $\|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2^2 = \sum_{i=1}^R |\sigma_i^{-1}(1 - \alpha' \sigma_i^2)^t < v_i, Y >|^2$

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

On peut étudier la fonction $f(\sigma) = \sigma^{-1}(1 - \alpha' \sigma^2)^t$ pour être plus précis, 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 de positivité des valeurs propres de $\begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1}(I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$, i.e. les $f(\sigma_r)$, lorsque $\alpha' < \sigma_{\max}^{-2}$.

On a finalement le résultat attendu.

□

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.

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 $\text{rg}(Z) = P$:

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = (Z^T Z)^{-1} (I_P - \alpha' Z^T Z)^t Z^T Y \quad (12)$$

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

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = Z^T (I_N - \alpha' Z Z^T)^t (Z Z^T)^{-1} Y \quad (13)$$

Démonstration:

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

- Dans le régime sous-paramétré: (cas du rang maximale)

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: (cas du rang maximale)

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: $\hat{\beta}_P = Z_P^\dagger Z_E \beta^*$, $\mathbb{E}_{\beta^*}(\text{tr}[(\hat{\beta}_t - \hat{\beta})^T (\hat{\beta} - \beta^*)]) = \sigma_{\beta^*}^2 \text{tr}[(Z_E Z_E^T)(Z_P Z_P^T)^{-1} (I_N - \alpha Z_P Z_P^T)^t]$ qui présente d'après la section précédente un comportement de double descente.

6.2.2 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 $R = rg(Z)$, $\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_R & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$.

Dans ce contexte en notant $\alpha'_i = \frac{2\alpha_i}{N}$, avec la décomposition en valeurs singulières (SVD) de $Z = U \Sigma V^T$ on a:

$$\begin{aligned} \hat{\beta}_t &= \sum_{k=0}^{t-1} \left(\prod_{i=k+1}^{t-1} \left[I_P - \frac{2\alpha_i}{N} Z^T Z \right] \right) \frac{2\alpha_k}{N} Z^T Y = V \left[\sum_{k=0}^{t-1} \left(\prod_{i=k+1}^{t-1} \left[I_P - \alpha'_i \Sigma^T \Sigma \right] \right) \alpha'_k \right] \Sigma^T U^T Y \\ \hat{\beta}_t &= V \begin{bmatrix} \sum_{k=0}^{t-1} \left(\prod_{i=k+1}^{t-1} (I_R - \alpha'_i \Sigma_R^2) \right) \alpha'_k & 0 \\ 0 & \left(\sum_{k=0}^{t-1} \alpha'_k \right) I_{P-R} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Sigma_R & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^T U^T Y = V \begin{bmatrix} \Sigma_R \sum_{k=0}^{t-1} \left(\prod_{i=k+1}^{t-1} (I_R - \alpha'_i \Sigma_R^2) \right) \alpha'_k & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y \\ \hat{\beta}_t &= \hat{\beta} + V \begin{bmatrix} \Sigma_R \sum_{k=0}^{t-1} \left(\prod_{i=k+1}^{t-1} (I_R - \alpha'_i \Sigma_R^2) \right) \alpha'_k - \Sigma_R^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y \end{aligned}$$

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, $\forall t > t_r$:

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} (I_R - \underline{\alpha}'_r \Sigma_R^2)^{t-t_r} \prod_{j=0}^{r-1} (I_R - \underline{\alpha}'_j \Sigma_R^2)^{t_{j+1}-t_j} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y \quad (14)$$

Démonstration:

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

Par récurrence à l'aide du théorème sur la descente de gradient simple, initialisation non-nulle. \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:

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

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 $f(\sigma) \underset{\sigma \rightarrow 0}{\sim} 1/\sigma$, et tel que $f'(\sigma) = \frac{-g(\sigma)}{\sigma^2} [2 \sum_{j=0}^r \frac{\Delta t_j \gamma_j \sigma^2}{1 - \gamma_j \sigma^2} + 1] \underset{\sigma \rightarrow 0}{\sim} -1/\sigma^2$ et dont les points critiques sont les solutions de $\sum_{j=0}^r \gamma_j \sigma^2 \Delta t_j (1 - \gamma_j \sigma^2)^{-1} = -1/2$ 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

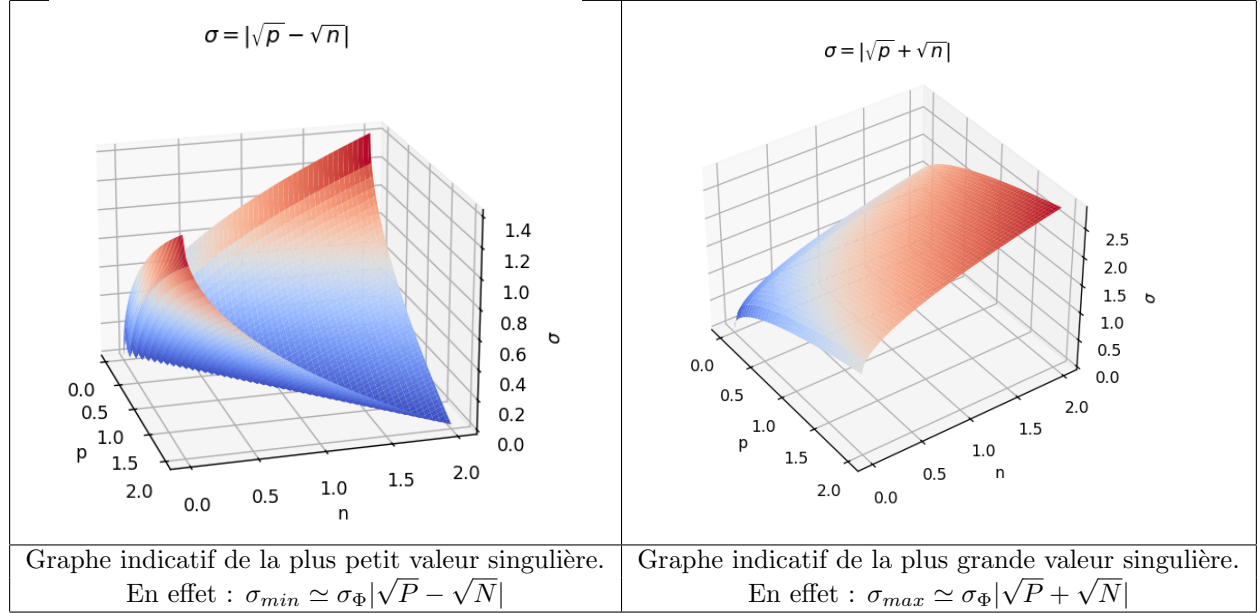
Ainsi, on a une erreur décroissante par rapport à t et σ . Donc σ_{min} ayant une courbe en U (voir section suivante) on a bien une courbe en U inversée pour l'erreur en fonction du quotient $P \setminus N$. Ainsi l'erreur apporté par la descente de gradient présente bien un apport au phénomène de double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

Remarque:

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 est compatible avec un cadre appliqué mais ne permet pas de réaliser une descente de gradient à pas optimal.

6.2.3 Analyse de la plus petite et plus grande valeur singulière



"On the limit of the largest eigenvalue" [9] et "Marchenko–Pastur distribution" 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 $\sigma_{max} \simeq \sigma_\Phi |\sqrt{P} + \sqrt{N}|$.

6.2.4 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 $\mathcal{D}_t \subset \mathcal{D}$, $\mathcal{D}_t = \{(x_{n_t(b)}, y_{n_t(b)}) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, b \in [1, B]\}$. Et $n_t : [1, B] \rightarrow [1, N]$ 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 $J \hookrightarrow \text{Diag}(\mathcal{U}([1, P]))$ et $\mathcal{D}_t \hookrightarrow \mathcal{U}(\mathcal{D}^B)$, indépendantes deux à deux on a alors:

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

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

6.3 Expressions théorique sur les MLP

Avec $\hat{y}_\beta(x) = W_L \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ W_1(x)$, tel que $W_l(x_l) = A_l x_l + b_l$ et $\sigma(x) = \max(0, x)$ fonction ReLU tq $\sigma'(x) = \mathbf{1}_{x \geq 0}$.

Cas particulier: Dans le cas suivant, $\hat{y}_\beta(x) = W_2 \circ \sigma \circ W_1(x) = A_2 \sigma(A_1 x + b_1) + b_2$, $\hat{y}_\beta : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$. On a ici : $A_1 \in \mathcal{M}_{P,D}(\mathbb{R})$ et $A_2 \in \mathcal{M}_{1,P}(\mathbb{R})$ D'où avec : $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_{\hat{\beta}}(x_i) - y_i)^2$ on a :

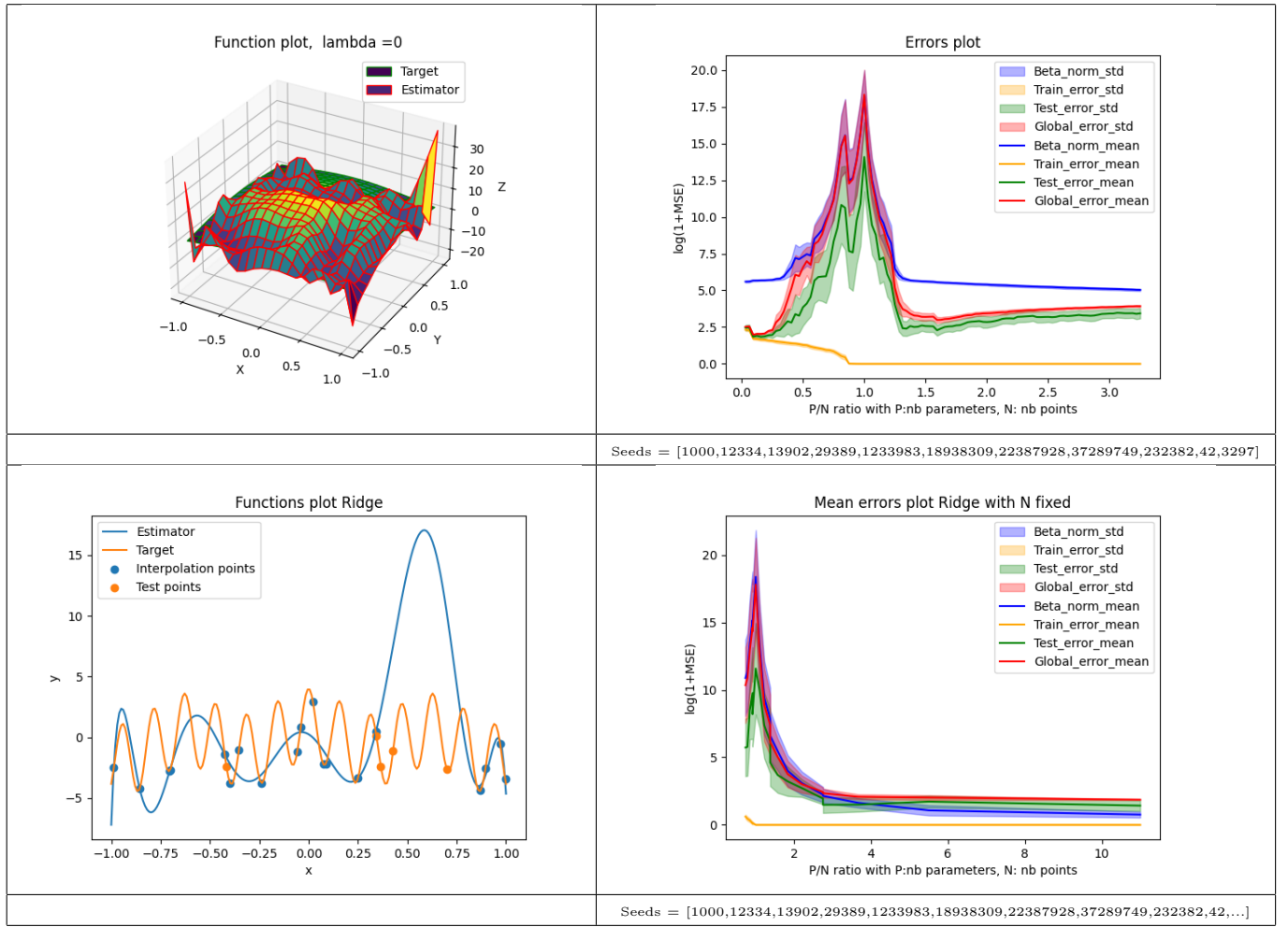
$$\text{Avec } \beta = \begin{bmatrix} A_1 \\ b_1 \\ A_2 \\ b_2 \end{bmatrix} \text{ on a } \nabla_\beta \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) = \begin{bmatrix} \nabla_{A_1} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) \\ \nabla_{b_1} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}}) \\ \nabla_{A_2} \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}})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

Avec \odot le produit d'Hadamard.

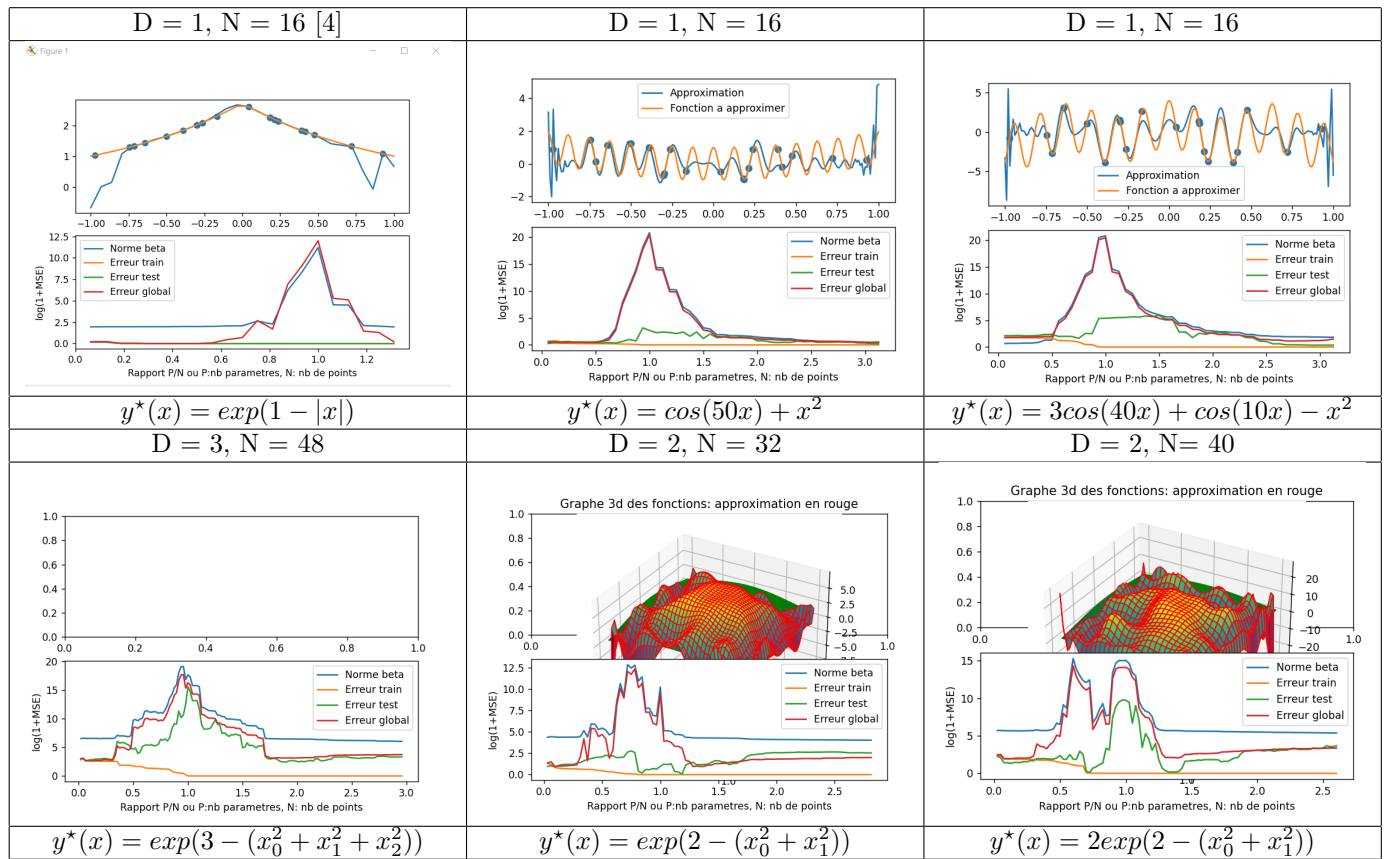
Et on a : $\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha \nabla_\beta \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t})$. On comprend donc qu'il n'est pas aisé d'obtenir une expression manipulable théoriquement.

7 Résultats expérimentaux

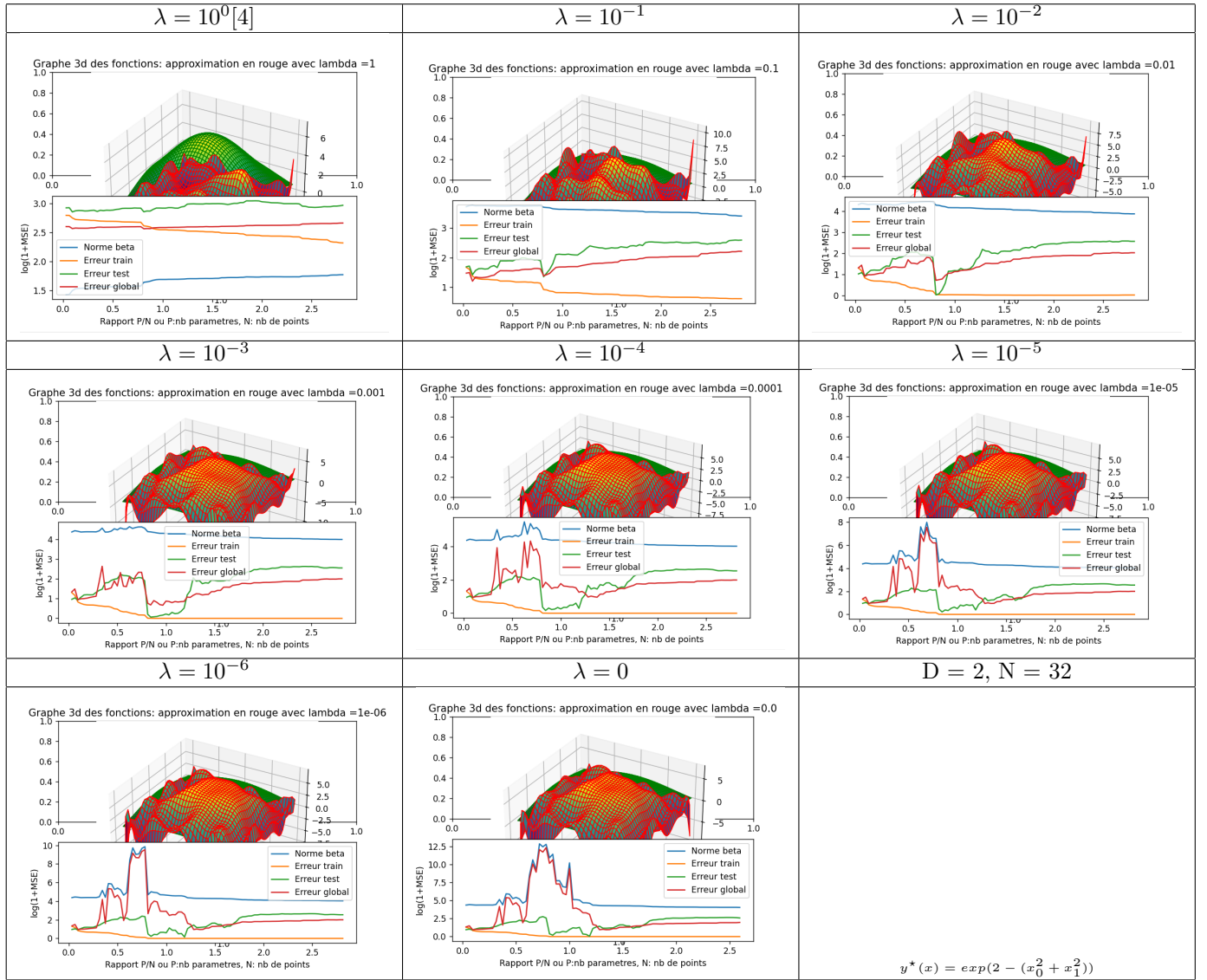
7.1 Régression polynomial



a, nexample = 1, 1, typepolynome = 2, D, Deg= 2,13, n = 20,M = 40 ,r = 0.2, Lambda = 0

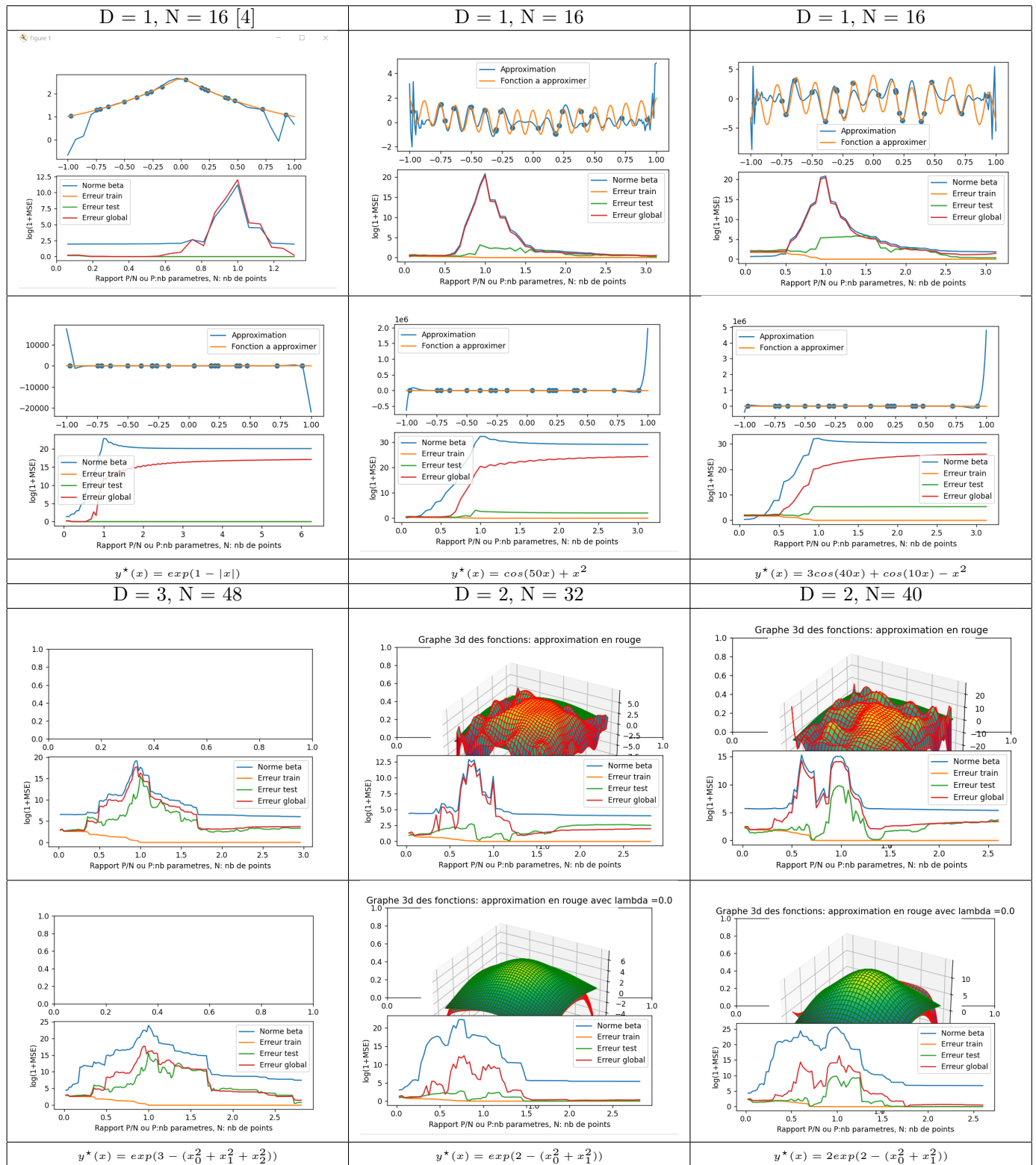


Résultats exhibant un phénomène de double descente en dimension 1, 2 et 3 pour des features polynomiales.



Résultats exhibant l'influence d'un facteur de régulation sur l'apparition du phénomène de double descente.

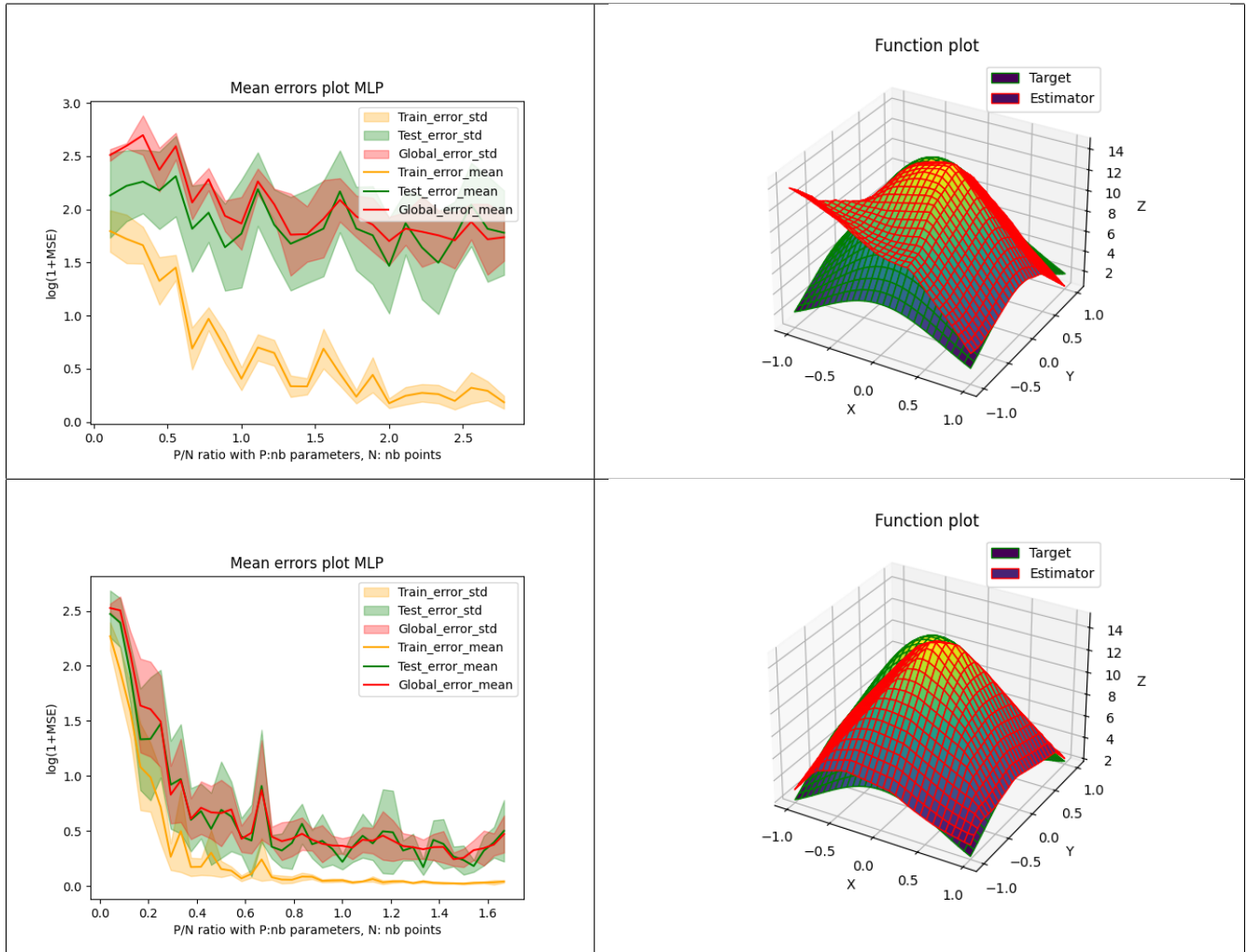
On remarque que la régulation permet d'empêcher totalement la venue d'un phénomène de double descente par rapport au nombre de paramètre. En effet, on peut considérer que la réelle complexité réside dans la norme du paramètre β . Or, on a une descente simple par rapport à ce paramètre. D'où le résultat.



Résultats exhibant l'influence d'une base orthonormalisée sur la double descente. Première ligne: Base orthonormalisée sur l'espace, Deuxième ligne: Base canonique

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

7.2 Multilayer Perceptron (MLP)



Graphe de la MSE d'un algorithme Multilayer Perceptron.

8 Détails numériques

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] 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.
- [3] 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.
- [4] Emmett Haddad. *Github Double Descente*. <https://github.com/EmettGabrielH/Double-descente---Emett-Haddad>. [Online]. 2024.
- [5] 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.
- [6] 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.

- [7] Rylan Schaeffer et al. “Double descent demystified: Identifying, interpreting & ablating the sources of a deep learning puzzle”. In: *arXiv preprint arXiv:2303.14151* (2023).
- [8] MM Wolf. “Mathematical foundations of supervised learning (growing lecture notes)”. In: (2018).
- [9] 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.

9 Appendices

9.1 Pseudo-code

9.1.1 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  BasisD' = [ $\prod_{d=1}^D X_d^{\alpha_d}$ ,  $\sum \alpha_d \leq D'$ ]
3  P = LENGHT(BasisD')
4  for  $1 \leq p \leq P$  do
5     $f'_p = \text{Basis}_{D'}[p] - \sum_{i=1}^{p-1} [\int_C \text{Basis\_orthod}_{D'}[i] \cdot \text{Basis}_{D'}[i]] \times \text{Basis\_orthod}_{D'}[i]$ 
6     $\text{Basis\_orthod}_{D'}[p] = \frac{f'_p}{\|f'_p\|_2}$ 
7  return Basis_orthodD'

```

Algorithm 2: Dataset initialisation

```

1 function dataset_initialisation(f, C, M, ratio_data)
  Input y, C, M, ratio_data:  $y : \mathbb{R}^D \rightarrow \mathbb{R}$ ,  $C = [[a_d, b_d], 1 \leq d \leq D]$ , 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   $X_{train}, X_{test}, Y_{train}, Y_{test} = \text{test\_split}(X, Y, \text{ratio\_data})$ 
6  return Xtrain, Xtest, Ytrain, Ytest

```

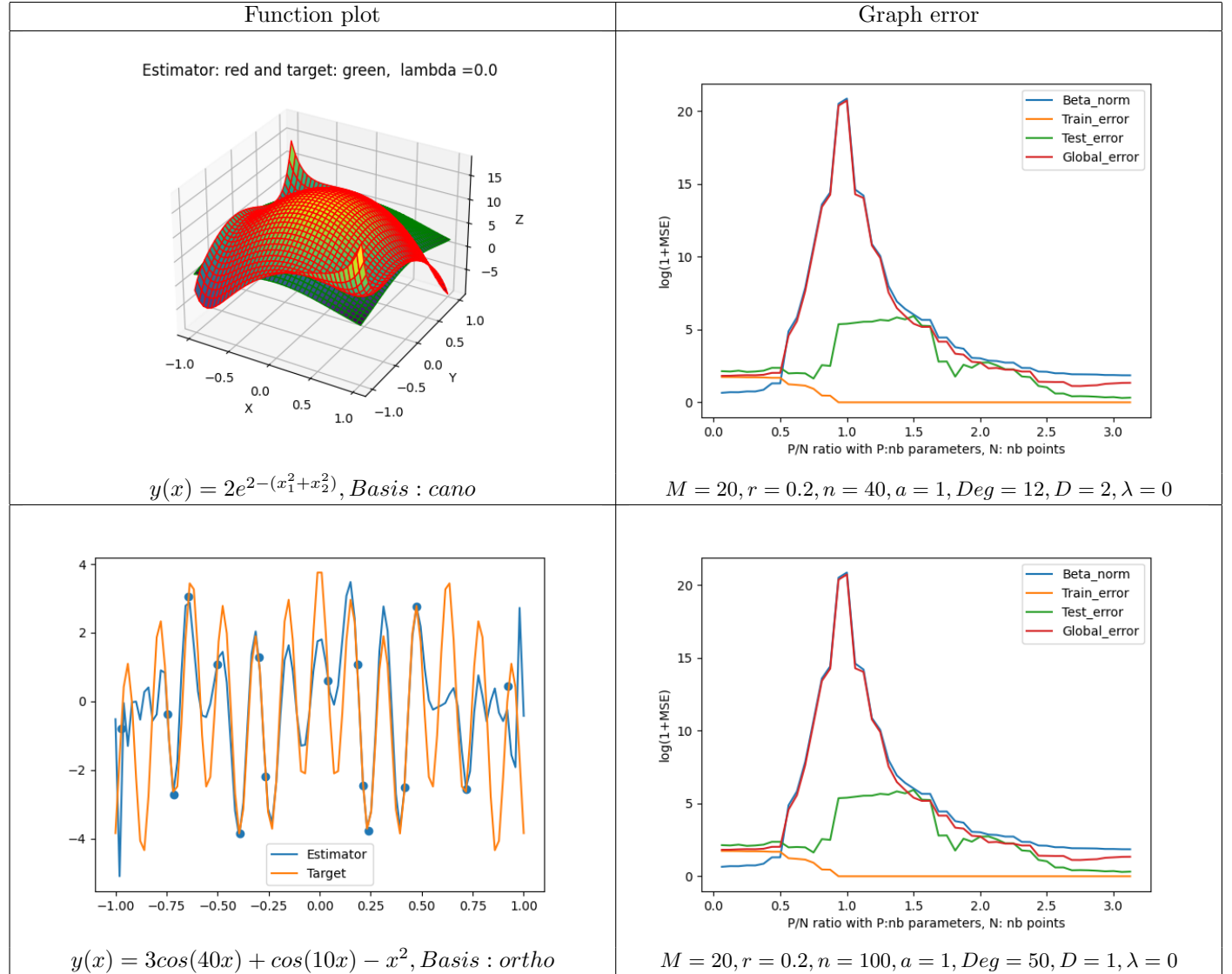
Algorithm 3: Ridge Regression

```

1 function ridge_regression(Pmin, Pmax, Features, λ, Data, Data_global)
2  Xtrain, Xtest, Ytrain, Ytest = Data
3  Xglobal, Yglobal = 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     $Z_p = \Phi_p^T(X_{train})$  #  $Z_p \in \mathcal{M}_{N,P}(\mathbb{R})$ 
7     $\hat{\beta}_p = \begin{bmatrix} Z_p \\ \sqrt{N\lambda}I_p \end{bmatrix}^+ \begin{bmatrix} Y_{train} \\ O_p \end{bmatrix}$ 
8    Train_error[p] = log(1 + MSE(Ytrain, Zpβp))
9    Test_error[p] = log(1 + MSE(Ytest, ΦpT(Xtest)βp))
10   Global_error[p] = log(1 + MSE(Yglobal, ΦpT(Xglobal)βp))
11   Beta_norm[p] = log(1 + ||βp||22)
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)



9.1.2 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      $\text{MLP} = \text{Affine}(1, P) \circ \sigma \circ \text{Affine}(P, D)$  # Creation of the MLP structure
6      $\text{MLP.fit}(X_{\text{train}}, Y_{\text{train}}, \text{Epochs}, \alpha)$ 
7      $\text{Train\_error}[p] = \log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{train}}, \text{MLP}(X_{\text{train}})))$ 
8      $\text{Test\_error}[p] = \log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{test}}, \text{MLP}(X_{\text{test}})))$ 
9      $\text{Global\_error}[p] = \log(1 + \text{MSE}(Y_{\text{test}}, \text{MLP}(X_{\text{global}})))$ 
10   $\hat{y} = \text{MLP}(P_{\max})$ 
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        $\text{score\_gradient} = \text{MLP}(x_{\text{train}}) - y_{\text{train}}$  # gradient of MSE
5        $\text{backpropagation}(\text{score\_gradient})$ 
6      $\text{update}(\alpha)$  # update weights
  
```

