

# Rapport - Double Descente - Emmett Haddad

Emmett Haddad, Encadrants: Nicolas Vayatis, Samuel Gruffaz

22/05/2024

## Contents

<b>1</b>	<b>Présentation du problème</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Régimes et Double Descente</b>	<b>2</b>
<b>3</b>	<b>Modèles</b>	<b>3</b>
3.1	Modèle par MLP: (Multi Layer Perceptron) . . . . .	3
3.2	Modèle linéaire: . . . . .	3
<b>4</b>	<b>Etat de l'art</b>	<b>4</b>
<b>5</b>	<b>Focus techniques</b>	<b>4</b>
5.1	Théorèmes de Belkin et al. . . . .	4
5.2	Théorème de Schaeffer et al. . . . .	5
5.3	Théorème de Kuzborskij et al . . . . .	5
5.4	Théorème de Francis Bach . . . . .	5
5.5	Théorème de Zhenyu et al. . . . .	5
<b>6</b>	<b>Des résultats</b>	<b>6</b>
6.1	Régression linéaires: Résultats théoriques . . . . .	6
6.2	Régression polynomial: Résultats expérimentaux . . . . .	9
6.3	Minimisation par descente de gradient . . . . .	13
6.3.1	Descente de gradient simple . . . . .	13
6.3.2	Descente de gradient à pas variable . . . . .	14
6.3.3	Analyse de la plus petite et plus grande valeur singulière . . . . .	15
6.3.4	Descente de gradient stochastique . . . . .	16
6.4	Résultats sur les MLP . . . . .	17
6.4.1	Résultats expérimentaux sur les MLP . . . . .	17
6.4.2	Expressions théorique sur les MLP . . . . .	17
<b>7</b>	<b>Détails numériques</b>	<b>18</b>

## 1 Présentation du problème

Un cours expliquant ce problème : [9]

### Définition 1. Fonction cible

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

**Définition 2. 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  $\epsilon$  représente le bruit tel que  $\mathbb{E}(\epsilon|x) = 0$ , et  $\mathbb{V}(\epsilon) = \sigma^2$ .

**Définition 3. Estimateur**

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

La **complexité** de  $\mathcal{H}$  est représentée ici par  $P$  le nombre de paramètres, bien que la meilleur notion actuelle de complexité est la complexité de Rademacher[9] qui est la capacité d'une classe de fonctions à s'adapter à du bruit.

**Définition 4. Erreur ponctuelle**

$\forall x_0 \in \mathcal{X}$

$$Err(x_0) := \mathbb{E}_{\mathcal{D}, \epsilon}((y - \hat{y})(x_0))^2 = \sigma^2 + \mathbb{V}_{\mathcal{D}}(\hat{y}(x_0)) + [\mathbb{E}_{\mathcal{D}}((y^* - \hat{y})(x_0))]^2 \quad (1)$$

Vrai risque et risque empirique:

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

## 2 Régimes et Double Descente

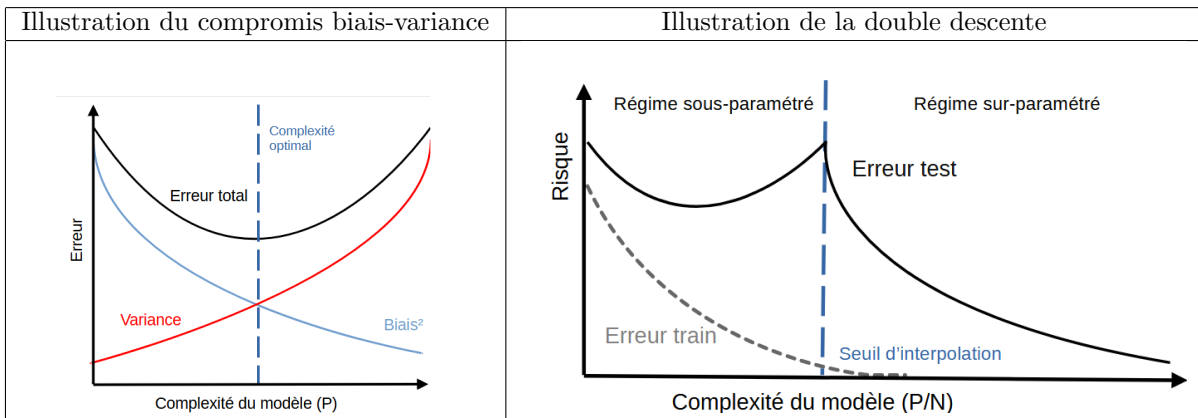
Notions de régimes:

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

**Définition 5. 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.

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 6.** *Modèle MLP*

- $\hat{y}_{\mathcal{D}}(x) = W_L \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ W_1(x)$ ,  $W_l(x_l) = A_l x_l + b_l$
- $\sigma(x) = \max(0, x)$  fonction *ReLU*.
- Par descente de gradient (stochastique).

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 7.** *Modèle linéaire*

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

**Définition 8.** *Optimisation par descente de gradient*

- Descente de gradient simple:

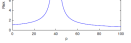

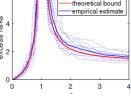
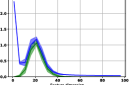
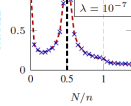
$$\hat{\beta}_{t+1} = \hat{\beta}_t - \alpha_t \nabla \hat{\mathcal{R}}(\hat{y}_{\hat{\beta}_t})$$

- Descente de gradient stochastique:

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

où  $J$  variable aléatoire entre 1 et  $P$ .

## 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. [6]	$f_p(x) = e_p(x)$ Descente de gradient et non pseudo-inverse	Majoration du vrai risque non-asymptotique	Inégalité de concentration	
Zhenyu et al. [7]	$f_p(x) = \cos((v_p, x))$ ou sin, pseudo-inverse	Limite MSE, asymptotique	Étude de la résolvante	

## 5 Focus techniques

### 5.1 Théorèmes de Belkin et al.

**Théorème 1.** *Belkin et al.- base canonique [2]*

Dans le cas où l'on sélectionne de manière uniforme  $P$  coordonnées dans la base canonique comme features. On a ici  $X^T X$  matrice de Wishart.

- Si  $P < N - 1$ :  

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

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

$$\mathbb{E}((y - \hat{y})^2) = +\infty$$

Preuve dans les grandes lignes:

On utilise les propriétés du pseudo-inverse (propriété de projecteur) et des manipulations sur la trace. On utilise ensuite l'espérance de l'inverse de Wishart.

## 5.2 Théorème de Schaeffer et al.

**Théorème 2.** *Schaeffer et al.[8]*

On se place dans le cas  $y = x^T \beta^* + e$  et  $\hat{\beta}$  donné par le pseudo inverse. On se place dans le cas ou  $X$  est de rang maximale. On se donne  $E = [e_1, \dots, e_N]^T$  et  $X = USV^T$  représentation SVD.

- **Régime sous-paramétré:**

$$\hat{y}(x) - y^*(x) = \sum_{r=1}^R \frac{1}{\sigma_r} (x^T v_r)(u_r^T E)$$

- **Régime sur-paramétré:**

$$\hat{y}(x) - y^*(x) = x^T (X^T (X X^T)^{-1} X - I) \beta^* + \sum_{r=1}^R \frac{1}{\sigma_r} (x^T v_r)(u_r^T E)$$

## 5.3 Théorème de Kuzborskij et al

**Théorème 3.** *Kuzborskij et al[6] en régime sur-paramétré*

$E_T := \mathcal{R}(\hat{y}_{\beta_T}) - \mathcal{R}(\hat{y}_{\beta_*})$  où  $\beta_T$  est le vecteur obtenu au bout de  $T$  itérations de descente de gradient de pas  $\alpha$ .

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

## 5.4 Théorème de Francis Bach

**Théorème 4.** *Francis Bach[1]*

On pose  $df_i(\lambda) = \text{tr}(\Sigma^i (\Sigma + \lambda I)^{-i})$ ,  $y = x^T S \beta^* + \epsilon$ . On pose  $y = x^T S \beta^* + \epsilon$ ,  $df_1(K_P) \sim P$ ,  $df_1(K_N) \sim N$  Alors:

- Si  $\delta < 1$ :

$$\mathbb{E}(R^{(var)}(\hat{\beta})) \sim \frac{\sigma^2 \delta}{1 - \delta}$$

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

- Si  $\delta > 1$ :

$$\mathbb{E}(R^{(var)}(\hat{\beta})) \sim \frac{\sigma^2}{\delta - 1} + \frac{\sigma^2 df_2(K_N)}{N - df_2(K_N)}$$

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

## 5.5 Théorème de Zhenyu et al.

**Théorème 5.** *Théorème de Zhenyu et al. [7]*

Avec  $W = \begin{bmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_P \end{bmatrix}$  où  $w \hookrightarrow \mathcal{N}(0, I_D)$  et  $Z = \begin{bmatrix} \cos(WX) \\ \sin(WX) \end{bmatrix}^T$

On pose  $E_{test} = \frac{1}{N'} \|Y' - Z_{X'} \hat{\beta}\|_2^2$ , sous certaines hypothèses sur  $X'$  et  $N, P, D$  on a asymptotiquement:  $E_{test} - \overline{E_{test}} \rightarrow 0$

$$\overline{E_{test}} = \frac{1}{N'} \|Y' - \frac{P}{N} \Phi' \overline{Q} Y\|^2 + \frac{P^2}{N^2 N'} \left[ \frac{\Theta_{cos}}{(1 + \delta_{cos})^2} \frac{\Theta_{sin}}{(1 + \delta_{sin})^2} \right] \Omega \begin{bmatrix} Y^T \overline{Q} K_{cos} \overline{Q} Y \\ Y^T \overline{Q} K_{sin} \overline{Q} Y \end{bmatrix} \quad (4)$$

## 6 Des résultats

### 6.1 Régression linéaires: Résultats théoriques

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.

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

**Théorème 6.** *Expression de l'estimateur*

Si  $P < N$ :

$$\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x)(Z^T Z)^{\dagger} Z^T Y = [f_1(x), \dots, f_P(x)][(f_i, f_j)_X]^{\dagger} \begin{bmatrix} (f_1, y)_X \\ \vdots \\ (f_P, y)_X \end{bmatrix} \quad (5)$$

Si  $P > N$ :

$$\hat{y}(x) = \Phi_P^T(x) Z^T (Z Z^T)^{\dagger} Y = ([\{G_P^{x_i}, G_P^{x_j}\}]^{\dagger} [\{G_P^{x_i}, G_P^{x_j}\}])^T Y \quad (6)$$

**Théorème 7.** *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  $Z$  devient maximale i.e  $\text{rg}(Z) = N$ .

**Démonstration.** En effet, en supposant  $\text{rg}(Z) = N$ , nous avons ce résultat par l'étude du Lagrangien [8], qu'il s'agit du minimum global pour la norme euclidienne dans l'espace affine  $\hat{\beta} + \text{Ker}(Z) = \{\beta, Y = Z(P)\beta\}$ :

$$\forall \beta \in \mathbb{R}^P, \forall \gamma \in \mathbb{R}^N \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = \|\beta\|_2^2 + \gamma^T (Y - Z(P)\beta) \quad (7)$$

En effet la solution de  $\nabla \mathcal{L}_P(\beta, \gamma) = 0$  est  $\hat{\beta}(P)$ . 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  $\|\hat{\beta}(P+1)\|_2 \leq \|\hat{\beta}'(P+1)\|_2 = \|\hat{\beta}(P)\|_2$ .

On remarque que ce phénomène ( $\text{rg}(Z) = N$ ) survient APCR 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) par exemple, quelle que soit la dimension.

On note E paramètres pour l'espace global, et on note P paramètres et  $P^C$  les autres paramètres parmi ces E paramètres. On rappelle  $Z_P = \Phi_P^T(X)$ ,  $Z_{P^C} = \Phi_{P^C}^T(X)$ ,  $Z_E = [Z_P, Z_{P^C}] = \Phi_E^T(X)$

**Théorème 8.** *Expression de l'excès de risque renormalisé*

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 orthonormées. On note  $\mathbb{E}(\Phi_E(x)\Phi_E(x)^T) = \sigma_{\Phi}^2 I_E$ .

On a alors:

$$\mathcal{E}(\hat{y}_D, \beta^*) = \sigma_{\Phi}^2 \cdot \|\hat{\beta} - \beta^*\|^2 = \sigma_{\Phi}^2 \cdot (\|\beta^*\|^2 + \|Z_P^{\dagger} Z_{P^C} \beta_{P^C}^*\|^2 - \text{tr}[(Z_P^{\dagger} Z_P) \beta_P^* \beta_P^{*T}]) \quad (8)$$

Remarque: Dans le cas d'une base orthonormée sur un cube I, avec x suivant une loi uniforme, on a  $\mathbb{E}_{x \rightarrow \mathcal{U}(I)}(f_i(x)f_j(x)) = \frac{1}{V(I)} \delta_{i,j} = \sigma_{\Phi}^2 \delta_{i,j}$ . En posant  $z = \Phi_E(x)$  on est dans le cas  $\Sigma = \mathbb{E}(zz^T) = \sigma_{\Phi}^2 I_E$ .

Ainsi on a:  $\mathbb{E}(\Phi_E(x)\Phi_E(x)^T) = \sigma_{\Phi}^2 I_E$  alors  $\mathcal{E}(\hat{y}, \beta^*) = \sigma_{\Phi}^2 \cdot \mathbb{E}(\|\hat{\beta} - \beta^*\|^2)$

De plus on fixe  $f_0(x) := 1$  et  $\forall p \geq 1$ ,  $\mathbb{E}(f_p(x)) = \mathbb{E}(f_0(x)f_p(x)) = 0$ . D'où en enlevant la constante, on a  $\mathbb{E}(\Phi_P(x)) = 0$ . 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 variante. On est dans le contexte de "Marchenko–Pastur distribution".

Remarque : (pour plus tard)

On a dans le cas de la descente de gradient:

$$\mathcal{E}(\hat{y}_{grad}, \beta^*) = \sigma_x^2 \cdot \mathbb{E}(\|\hat{\beta}_{grad} - \beta^*\|^2) = \sigma_x^2 \cdot \mathbb{E}(\|\hat{\beta}_{grad} - \hat{\beta}_{inv}\|^2 + 2 \langle \hat{\beta}_{grad} - \hat{\beta}_{inv}, \hat{\beta}_{inv} - \beta^* \rangle + \|\hat{\beta}_{inv} - \beta^*\|^2)$$

**Démonstration.** On s'inspire de la preuve de Belkin et al [2]. On note de même  $\beta_P$  pour parler de  $P$  composante de  $\beta$ , de même pour les vecteurs colonnes des matrices. On note  $\beta_{PC}$  pour les autres composantes.

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

D'où on a  $\mathcal{R}(\hat{y}_D) - \mathcal{R}(y^*) = \text{tr}[\mathbb{E}(\Phi_E(x)\Phi_E(x)^T)\mathbb{E}((\hat{\beta} - \beta^*)(\hat{\beta} - \beta^*)^T)] = \sigma_\Phi^2 \mathbb{E}(\|\hat{\beta} - \beta^*\|^2)$

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

**Corollaire 1.** Expression de l'excès de risque

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

$$(\sigma_\Phi \sigma_{\beta^*})^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_D) = E - 2\text{rg}(Z_P) + \text{tr}[Z_E Z_E^T (Z_P Z_P^T)^\dagger] \quad (9)$$

**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:

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

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

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

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

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

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

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

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

**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.

$$\bar{\mathcal{E}}(\gamma, \delta) := \lim_{N \rightarrow +\infty, \frac{P}{N} \rightarrow \gamma, \frac{E}{N} \rightarrow \delta} \mathcal{E}(\hat{y}_D) = \sigma_\Phi^2 \left[ 1 - 2 \frac{\max(\gamma, 1)}{\delta} + \frac{\max(\gamma, 1)}{\delta} \left| \frac{1 - \delta}{1 - \gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|^2 \quad (10)$$

**Démonstration.** de cette conjecture

On se place dans le cadre  $\|\beta^*\|^2 = \text{tr}(\beta^* \beta^{*T}) = \text{constante}$ . 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  $\frac{P}{N} \rightarrow \gamma$ .

Equation et 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:

$$\sigma_{\Phi}^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_D) = \left[ 1 - \frac{2P}{E} + \frac{P}{E} \frac{1}{P} \text{tr}[\mathbf{Z}_E \mathbf{Z}_E^T (\mathbf{Z}_P \mathbf{Z}_P^T)^{\dagger}] \right] \cdot \|\beta^*\|^2$$

$$\mathcal{E}(\hat{y}) \sim \sigma_{\Phi}^2 \left[ 1 - 2\frac{\gamma}{\delta} + \frac{\gamma}{\delta} \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|^2$$

- Régime sur-paramétré:

$$\sigma_{\Phi}^{-2} \mathcal{E}(\hat{y}_D) = \left[ 1 - \frac{2N}{E} + \frac{N}{E} \frac{1}{N} \text{tr}[\mathbf{Z}_E \mathbf{Z}_E^T (\mathbf{Z}_P \mathbf{Z}_P^T)^{\dagger}] \right] \cdot \|\beta^*\|^2$$

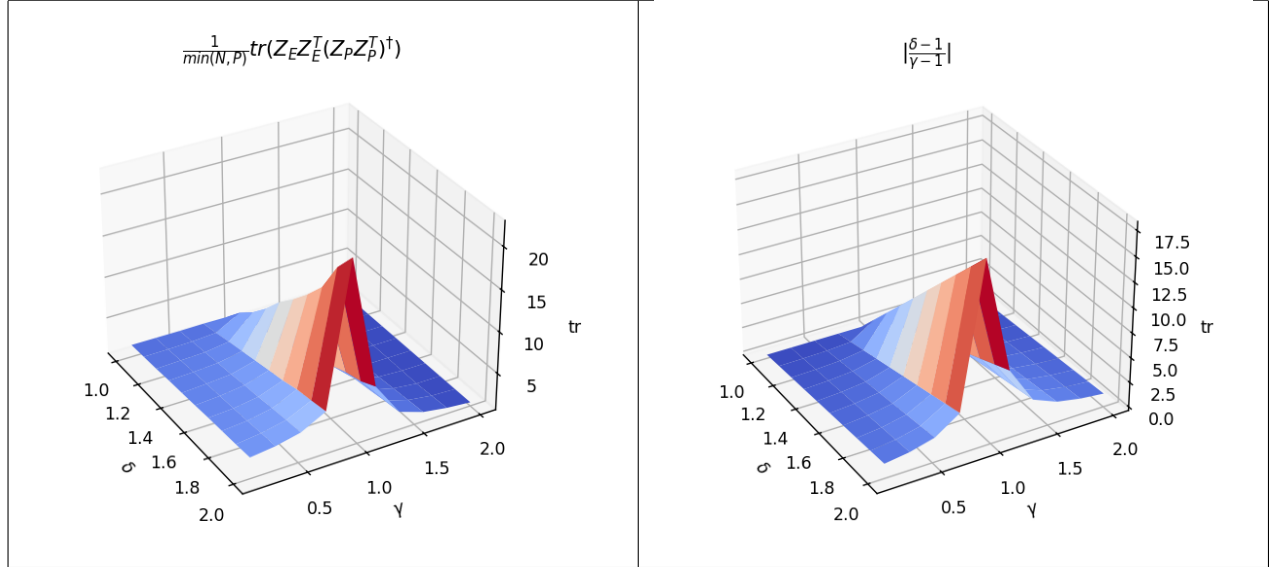
$$\mathcal{E}(\hat{y}) \sim \sigma_{\Phi}^2 \left[ 1 - 2\frac{1}{\delta} + \frac{1}{\delta} \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right| \right] \cdot \|\beta^*\|^2$$

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

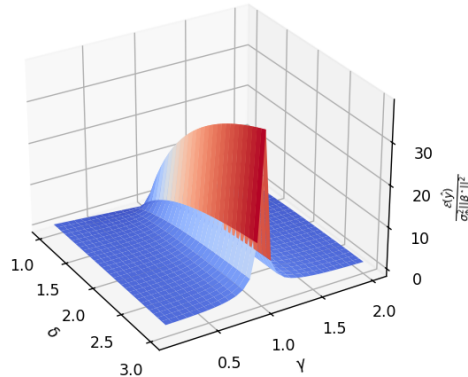
Et on peut aussi tenter d'utiliser la "distribution de Marchenko-Pastur" sur  $\frac{1}{N} \mathbf{Z}_P \mathbf{Z}_P^T$ .

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



Remarque: Pour  $E = P$  on trouve alors  $\mathcal{E}(\hat{y}) = \max(0, (1 - \frac{1}{\gamma}))$  et on n'a pas de double descente. Mais pour  $\delta > 1$  on en a une.

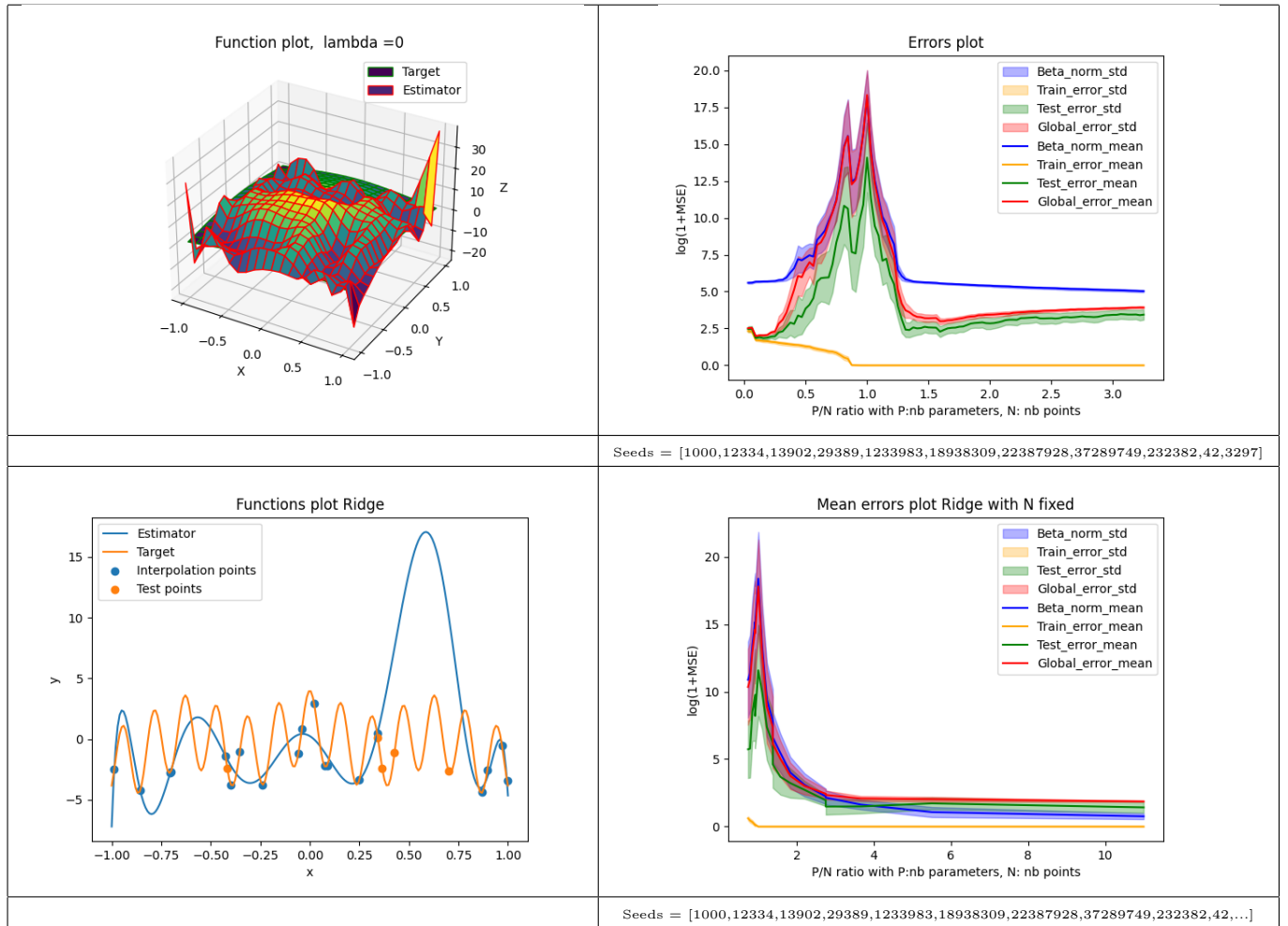
$$\frac{\mathcal{E}(\hat{y})}{\sigma_{\Phi}^2 \|\beta^*\|^2} = \left[ 1 - 2\frac{\max(\gamma, 1)}{\delta} + \frac{\max(\gamma, 1)}{\delta} \left| \frac{1-\delta}{1-\gamma} \right| \right]$$



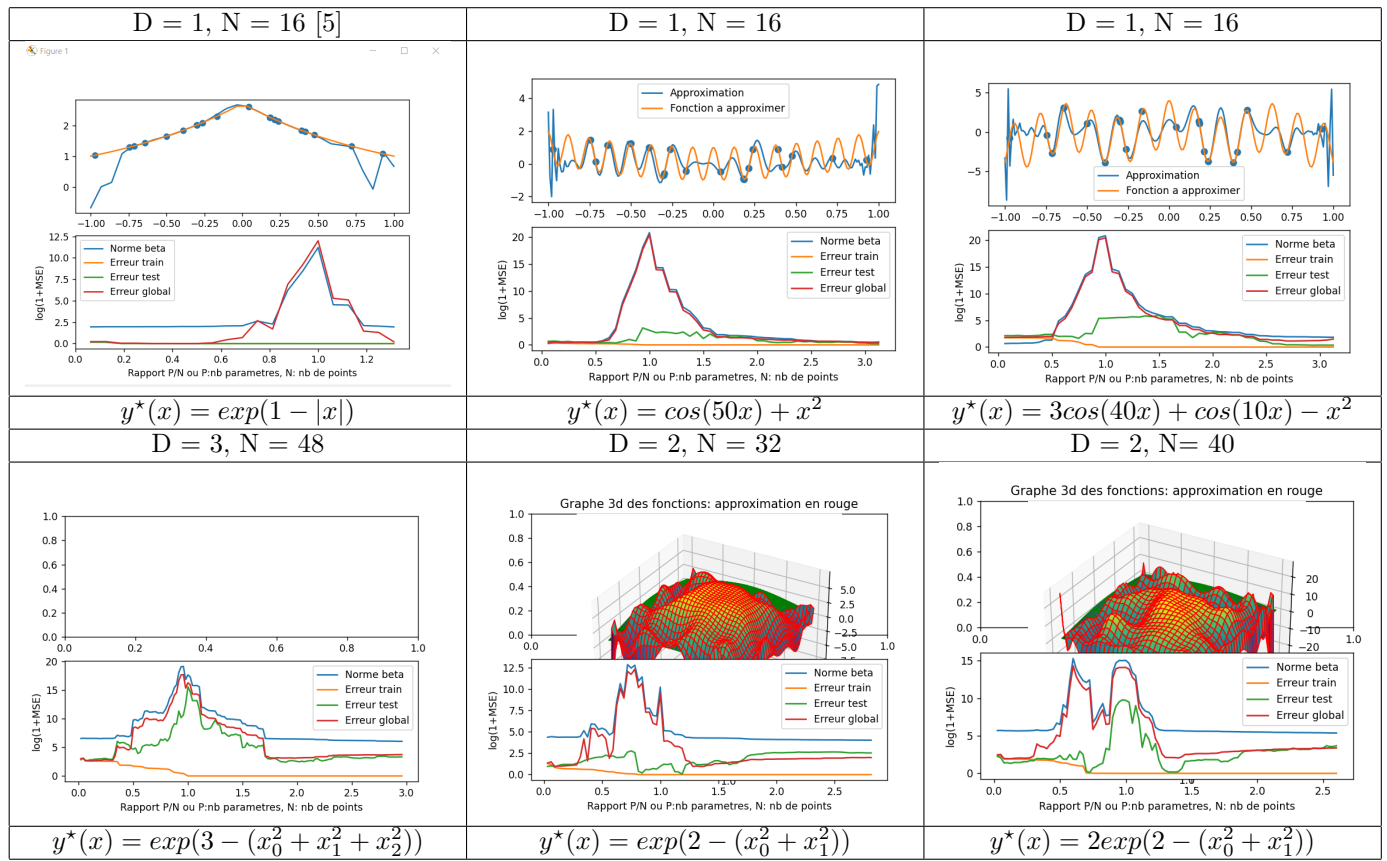


## 6.2 Régression polynomiale: Résultats expérimentaux

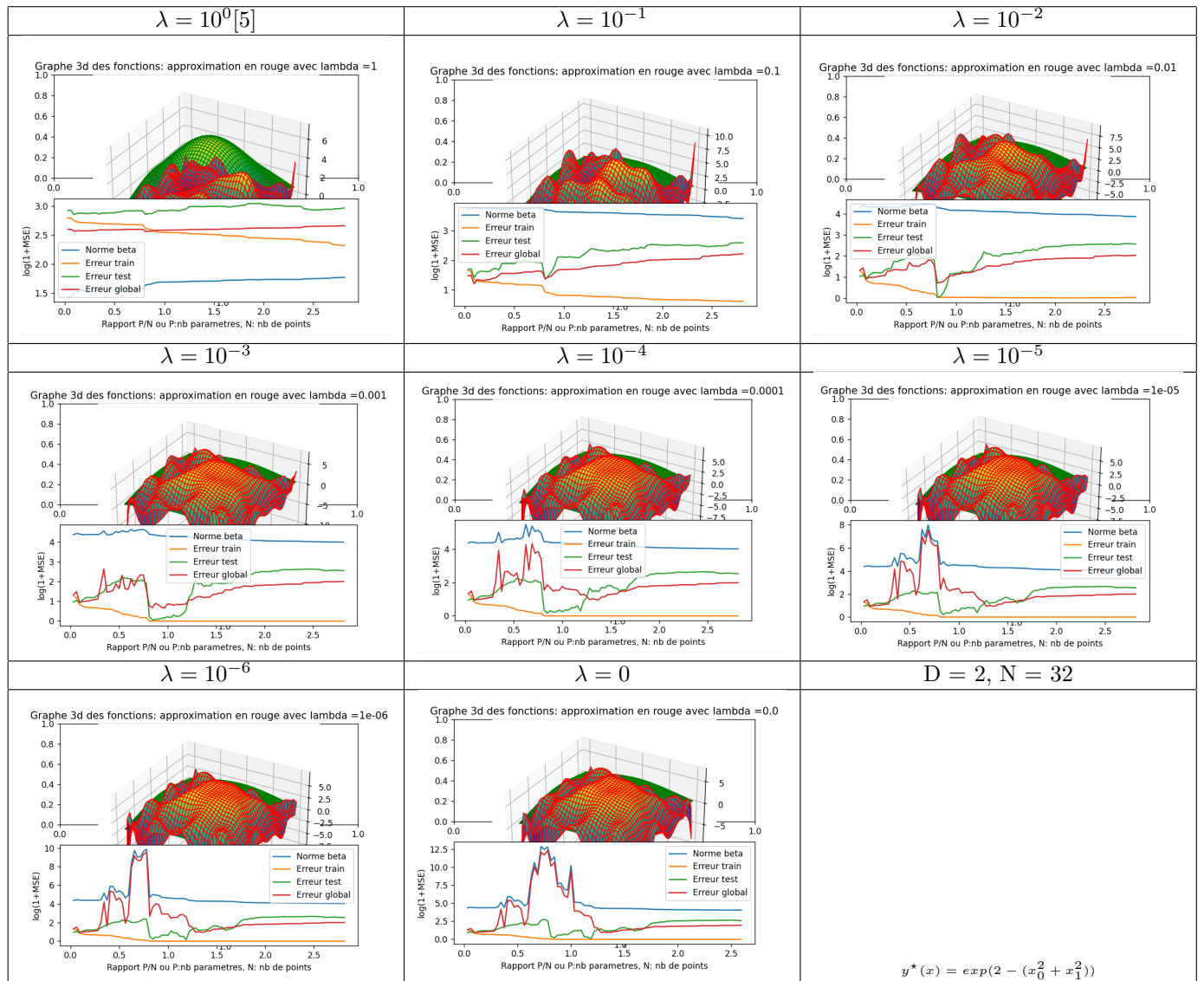
Demo en ligne [4] et github associé [5].



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

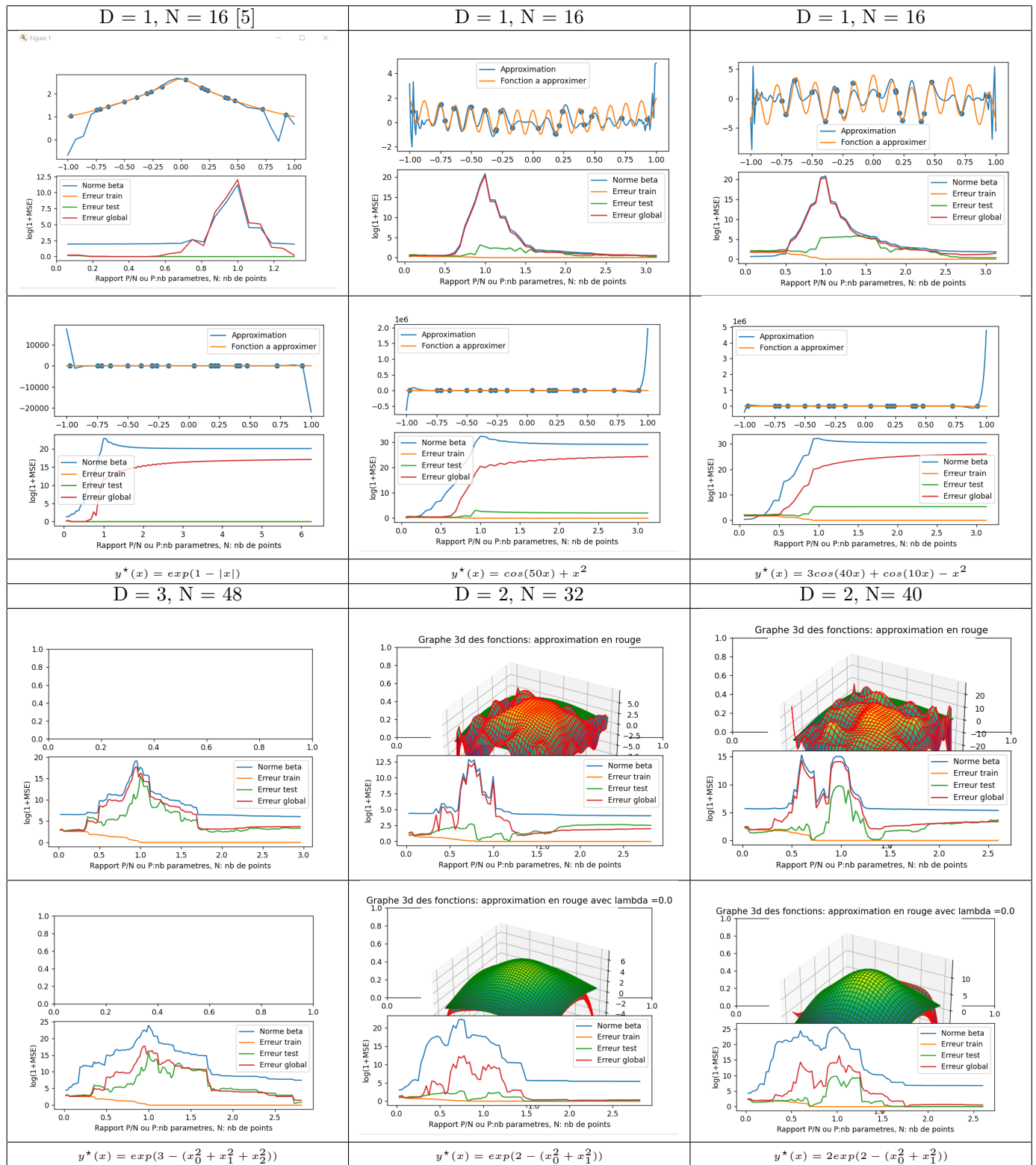


Résultats exhibant un phénomène de double descente en dimension 1, 2 et 3 pour des features polynomiales.



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  $\beta$ . 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.

## 6.3 Minimisation par descente de gradient

### 6.3.1 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

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

On fixe  $\hat{\beta}_0 = 0$ , et on note  $\alpha' = \frac{2\alpha}{N}$ .

Dans le cas général:

**Théorème 9.** *Approximation par descente de gradient simple Avec  $\hat{\beta}_t$  le résultat de t descente de gradient de pas  $\alpha' < \sigma_{max}^{-2}$  et  $\hat{\beta}_0 = 0$ . Avec  $\sigma_{min} > 0$  la plus petite valeur singulière non-nulle de Z, on a:*

$$\sigma_{max}^{-1} (1 - \alpha' \sigma_{max}^2)^t \|Y\|_2 \leq \|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2 \leq \sigma_{min}^{-1} (1 - \alpha' \sigma_{min}^2)^t \|Y\|_2 \quad (11)$$

**Démonstration.** On s'attend classiquement a 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:

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

Dans le cas général on a  $\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = V \begin{bmatrix} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t & 0 \\ 0 & I_{P-R} \end{bmatrix} V^T [\hat{\beta}_0 - \hat{\beta}]$

Or on rappelle que  $\hat{\beta} = Z^\dagger Y$ . Si de plus  $\alpha < \frac{N}{2\|Z\|_2^2}$  alors:

$$\|\hat{\beta}_t - \hat{\beta}\|_2 \leq \rho(\Sigma_R^{-1} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t) \|Y\|_2$$

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

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. Donc, sous nos hypothèses, on a  $\rho(\Sigma_R^{-1} (I_R - \alpha' \Sigma_R^2)^t) = \sigma_{min}^{-1} (1 - \alpha' \sigma_{min}^2)^t$ .

On a finalement le résultat attendu.

Remarque: On remarque que l'on retrouve un résultat proche de celui de la descente de gradient classique, ici  $\hat{\mathcal{R}}$  étant  $\mu = \frac{2}{N}$  fortement convexe.

**Théorème 10.** *Résultat de la descente de gradient simple, cas du rang maximale*  
*On suppose que  $\hat{\beta}_0 = 0$  et que  $\alpha$  constant le pas de la descente.*

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

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = (Z^T Z)^{-1} (I_P - \frac{2\alpha}{N} Z^T Z)^t Z^T Y \quad (12)$$

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

$$\hat{\beta} - \hat{\beta}_t = Z^T (I_N - \frac{2\alpha}{N} Z Z^T)^t (Z Z^T)^{-1} Y \quad (13)$$

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

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

$\lambda_{\min}(Z^T Z) > 0$  d'où il suffit pour avoir la convergence ici que  $\lambda_{\max}(Z^T Z) < \frac{N}{\alpha}$  i.e.  $\alpha < \frac{N}{\|Z\|_2^2}$ .

Et 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  $Z^\dagger Y - \hat{\beta}_t = V \left[ \Sigma_N^{-1} (I_N - \alpha' \Sigma_N^2)^t \right] U^T Y = V \begin{bmatrix} \Sigma_N \\ 0 \end{bmatrix} (U^T U) (I_N - \alpha' \Sigma_N^2)^t (U^T U) \Sigma_N^{-2} U^T Y = (V \Sigma^T U^T) (I_N - \alpha' U \Sigma_N^2 U^T)^t (U \Sigma_N^2 U^T)^{-1} Y$

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

### 6.3.2 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:

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

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

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

$$\hat{\beta}_t = \sum_{k=0}^{t-1} (\prod_{i=k+1}^{t-1} [I_P - \frac{2\alpha_i}{N} Z^T Z]) \frac{2\alpha_k}{N} Z^T Y = V [\sum_{k=0}^{t-1} (\prod_{i=k+1}^{t-1} [I_P - \alpha'_i \Sigma^T \Sigma]) \alpha'_k] \Sigma^T U^T Y$$

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

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

On va tenter de simplifier le problème en considérant un pas  $\alpha_t$  constant par morceaux et cela permettra d'obtenir une forme explicite de l'erreur, commençons par un cas simple.

Supposons que  $\forall t \leq t_1 - 1, \alpha_t = \underline{\alpha}_1$  et que  $\forall t > t_1 - 1, \alpha_t = \underline{\alpha}_2$ .

Alors:  $\forall t > t_1$

$$\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = V \begin{bmatrix} \Sigma_R (I_R - \underline{\alpha}_2 \Sigma_R^2)^{t-t_1} \sum_{k=0}^{t_1-1} (I_R - \underline{\alpha}_1 \Sigma_R^2)^{t_1-k-1} \underline{\alpha}_1 + \Sigma_R \sum_{k=t_1}^{t-1} (I_R - \underline{\alpha}_2 \Sigma_R^2)^{t-k-1} \underline{\alpha}_2 - \Sigma_R^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y$$

$$\hat{\beta}_t - \hat{\beta} = -V \begin{bmatrix} \Sigma_R^{-1} (I_R - \underline{\alpha}_2 \Sigma_R^2)^{t-t_1} (I_R - \underline{\alpha}_1 \Sigma_R^2)^{t_1} & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^T Y$$

On suppose maintenant  $t_1, \dots, t_r$  changements de pas de descente de gradient. On a alors avec  $t_0 = 0$  et  $t_{r+1} = t - 1$ :  $\forall j \leq r \forall t \in [t_j, t_{j+1}[$ ,  $\alpha'_t = \underline{\alpha}'_j$ . On s'appuie sur l'expression générale par récurrence sur le nombre de phase, avec  $\beta_0 = 0$

**Théorème 11.** Descente de gradient à pas constant par morceaux tel que  $\hat{\beta}_0 = 0, \forall t > t_r$

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

On remarque qualitativement avec cette expression à l'aide des variations de la fonction  $f(\sigma) = \sigma^{-1} \prod_{j=0}^r (1 - \alpha_j \sigma^2)^{\Delta t_j} = \sigma^{-1} g(\sigma)$ , tel que  $f(\sigma) \underset{\sigma \rightarrow 0}{\sim} 1 \backslash \sigma$ , et tel que  $f'(\sigma) = \frac{-g(\sigma)}{\sigma^2} [2 \sum_{j=0}^r \frac{\Delta t_j \alpha_j \sigma^2}{1 - \alpha_j \sigma^2} + 1] \underset{\sigma \rightarrow 0}{\sim} -1 \backslash \sigma^2$  et dont les points critiques sont les solutions de  $\sum_{j=0}^r \alpha_j \sigma^2 \Delta t_j (1 - \alpha_j \sigma^2)^{-1} = -1 \backslash 2$  et les points  $\sigma = \alpha_j^{-1 \backslash 2}$ . Sous la condition  $\max(\alpha'_j) \leq \sigma_{\max}^{-2}$ , 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 11 et le lemme:  $\sigma(A)_{\min} \|X\|_2 \leq \|AX\|_2 \leq \sigma(A)_{\max} \|X\|_2$

**Théorème 12.** Approximation par descente de gradient à pas variable

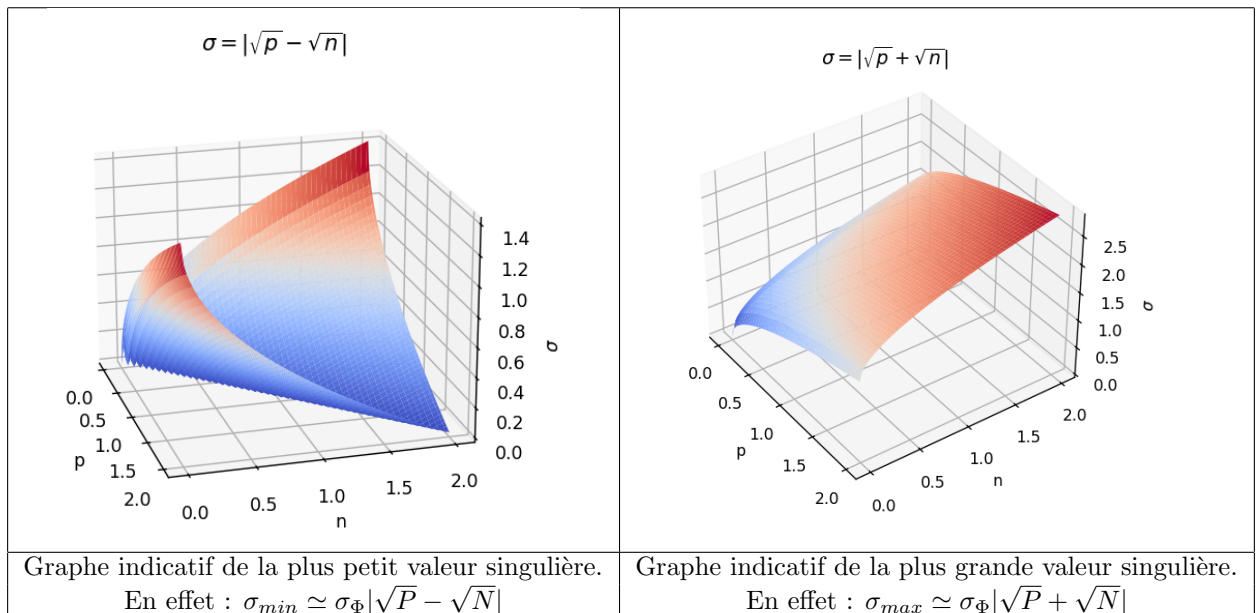
Dans le cas où  $\hat{\beta}_0 = 0$  et  $\max(\alpha'_j) < \sigma_{\max}^{-2}$ , en notant  $t_{r+1} := t > t_r$  on a:

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

Ainsi, on a une erreur décroissante par rapport à  $t$  et  $\sigma$ . Donc  $\sigma_{\min}$  ayant une courbe en U (voir section suivante) on a bien une courbe en U inversée pour l'erreur en fonction du quotient  $P \backslash N$ . Ainsi l'erreur apporté par la descente de gradient présente bien un apport au phénomène de double descente. De plus, on remarquera qu'ici l'inégalité obtenue est optimal au sens que la seule inégalité utilisée dans la preuve est  $\sigma(A)_{\min} \|X\|_2 \leq \|AX\|_2 \leq \sigma(A)_{\max} \|X\|_2$ .

Remarque: 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.

### 6.3.3 Analyse de la plus petite et plus grande valeur singulière



"On the limit of the largest eigenvalue" [10] et "Marchenko–Pastur distribution" pour  $P \rightarrow +\infty$  et  $P \backslash N$  converge.

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  $\sigma_{max} \simeq \sigma_\Phi |\sqrt{P} + \sqrt{N}|$ .

### 6.3.4 Descente de gradient stochastique

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

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

où  $J$  variable aléatoire entre 1 et  $P$ . Ici,  $J_t$  désigne la coordonnée du gradient que l'on calcul à l'étape  $t$ . Donc avec  $D_J = \text{Diag}(\delta_J)$  on trouve  $\hat{\beta}_{t+1} = [I_P - \alpha'_t D_{J_t} Z^T Z] \hat{\beta}_t + \alpha'_t D_{J_t} Z^T Y$

D'où:

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

Ainsi en prenant  $J \hookrightarrow \mathcal{U}([1, P])$  et indépendantes deux à deux on a alors:

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

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

La descente de gradient stochastique sur un batch pris dans l'échantillon est donnée par:

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

où à l'étape  $t$   $\mathcal{D}_t \subset \mathcal{D}$ ,  $\mathcal{D}_t = \{(x_{n_t(b)}, y_{n_t(b)}) \in \mathcal{X} \times \mathcal{Y}, b \in [1, B]\}$ . Et  $n_t : [1, B] \rightarrow [1, N]$  une injection. On peut alors poser  $D_t := [\delta_{n(i), j}] \in \mathcal{M}_{B, N}(\mathbb{R})$  on a:

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

Et  $P_t := D_t^T D_t = \text{Diag}(\delta_{i \in I_m(n_t)})$  donne:

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

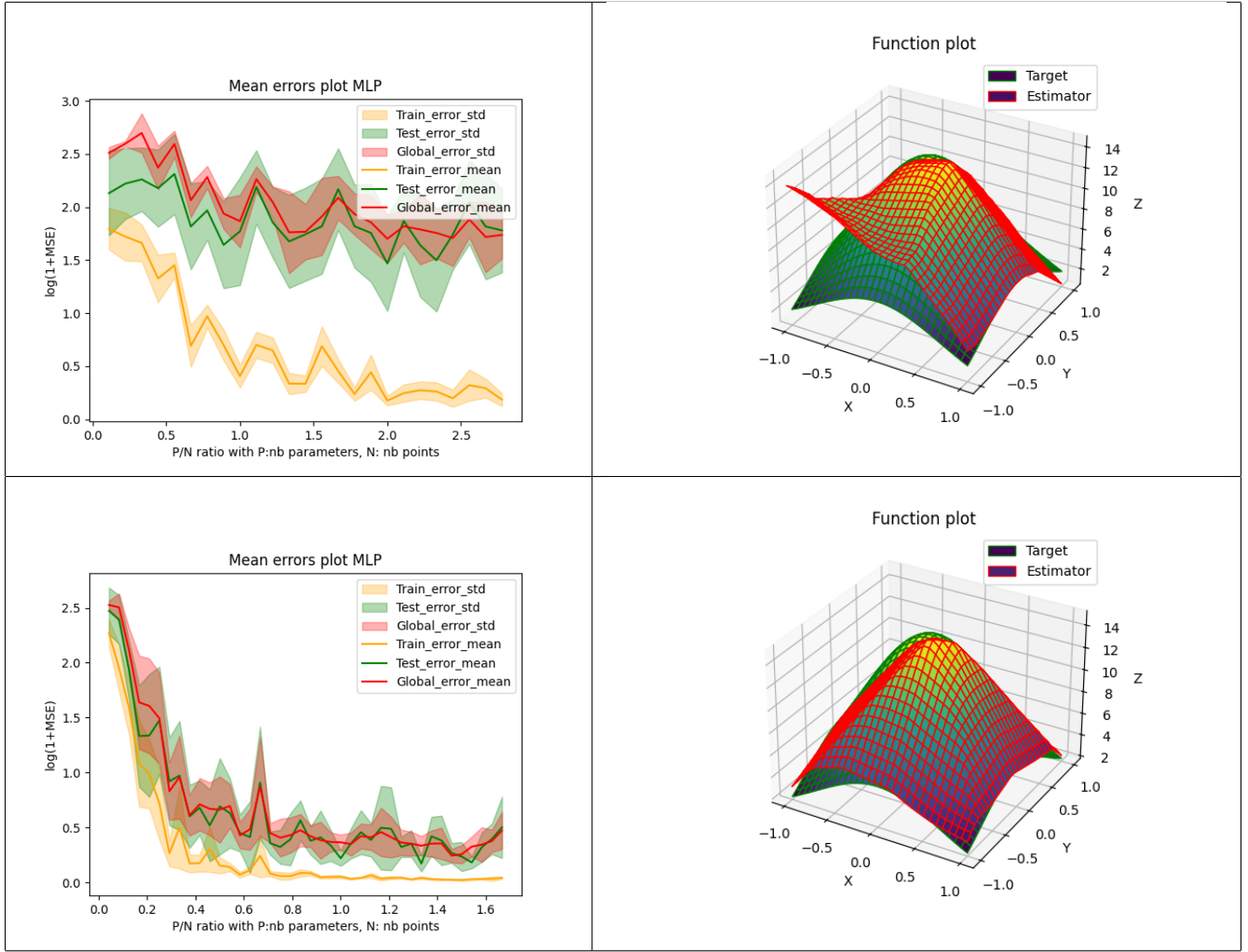
Ainsi en prenant  $\mathcal{D}_t \hookrightarrow \mathcal{U}(\mathcal{D}^B)$  et indépendantes deux à deux on a alors:

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



## 6.4 Résultats sur les MLP

### 6.4.1 Résultats expérimentaux sur les MLP



Graphe de la MSE d'un algo MLP

### 6.4.2 Expressions théorique sur les MLP

$\hat{y}_\beta(x) = W_L \circ \sigma \circ \dots \circ \sigma \circ W_1(x)$  On a

$W_l(x_l) = A_l x_l + b_l$  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 :  $\hat{\mathcal{R}}_{\mathcal{D}}(\hat{y}_\beta) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_\beta(x_i) - y_i)^2$  on a :

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

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 théoriquement.

## 7 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] Emett Haddad. *Demo Double Descente*. <https://ipolcore.ipol.im/demo/clientApp/demo.html?id=77777000515>. [Online]. 2024.
- [5] Emett Haddad. *Github Double Descente*. <https://github.com/EmettGabrielH/Double-descente---Emett-Haddad>. [Online]. 2024.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] Rylan Schaeffer et al. “Double descent demystified: Identifying, interpreting & ablating the sources of a deep learning puzzle”. In: *arXiv preprint arXiv:2303.14151* (2023).
- [9] MM Wolf. “Mathematical foundations of supervised learning (growing lecture notes)”. In: (2018).
- [10] 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.