Les reproducing kernel Hilbert spaces

Présentation du TER, supervisé par Christophe Giraud

Matthieu Denis

Université Paris Saclay

31 août 2021

Contexte

- X un ensemble quelconque
- H un espace de Hilbert de fonctions réelles sur X
- $\forall x \in X,\ L_x$ une forme linéaire sur H :

$$L_x : f \mapsto f(x)\ \forall f \in H$$

Définitions

Définition : RKHS

L_x est bornée sur H, i.e :

$$\forall x \in X,\ \exists M_x > 0,\ \forall f \in H \text{ t.q } |L_x(f)| := |f(x)| \leq M_x ||f||_H$$

Définitions

Définition : Noyau / Kernel

Une fonction $k : X \times X \to \mathbb{R}$ est un noyau si

$$\exists \phi : X \to H \text{ t.q } k(x, y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_H \ \forall x, y \in X$$

Définitions

Définition : Noyau / Kernel

Une fonction $k : X \times X \to \mathbb{R}$ est un noyau si

$$\exists \phi : X \to H \text{ t.q } k(x,y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle_H \ \forall x, y \in X$$

Définition : Noyau Reproduisant / Reproducing Kernel

Une fonction $k : X \times X \to \mathbb{R}$ est un noyau reproduisant de H si $\forall x \in X$, $f \in H$:

- $k(\cdot, x) \in H$
- $f(x) = \langle f, k(\cdot, x) \rangle_H$

Noyaux classiques

- $k(x, y) := \langle x, y \rangle$
- $k(x, y) := (\alpha \langle x, y \rangle + 1)^d, \ \alpha \in \mathbb{R}, \ d \in \mathbb{N}$
- $k(x, y) := \exp(||x - y||^2/(2\sigma^2)), \ \sigma > 0$
- $k(x, y) := \exp(||x - y||/\sigma), \ \sigma > 0$

Résultats importants

Propriété :
Noyau reproduisant $\Longrightarrow$ Noyau.

Résultats importants

Propriété :
Noyau reproduisant $\Longrightarrow$ Noyau.

Théorème :
H est un RKHS $\Longleftrightarrow \exists!$ noyau reproduisant de H.

Résultats importants

Propriété :
Noyau reproduisant $\Longrightarrow$ Noyau.

Théorème :
H est un RKHS $\Longleftrightarrow$ $\exists!$ noyau reproduisant de H.

Théorème de Moore-Aronszaj :
Soit k un noyau. Alors $\exists!$ espace de Hilbert H de fonctions sur X pour lequel k est un noyau reproduisant.

Application au ML : Le Representer Theorem

Soit k un kernel sur X et soit H son RKHS associée. Posons $x_1, \cdots, x_n \in X$ notre training sample. Regardons le problème d'optimisation suivant :

$$\min_{f \in H} J(f) := E(f(x_1), \cdots, f(x_n)) + P(||f||_H^2)$$

Où P est une fonction croissante.
Alors si ce problème d'optimisation a (au-moins) une solution, il y a (au-moins) une solution de la forme

$$f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot k(\cdot, x_i)$$

De plus, si P est strictement croissante, alors toute solution a cette forme.

Kernel Ridge Regression

Ici, $J(f) := \sum_{i=1}^{n}(y_i - f(x_i))^2 + \lambda||f||_H^2$, prenons k un kernel sur X. Le representer theorem nous dit que la solution de ce problème (sous couvert d'existence) est nécessairement de la forme

$$f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot k(\cdot, x_i)$$

Kernel Ridge Regression

Ici, $J(f) := \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 + \lambda ||f||_H^2$, prenons k un kernel sur X. Le representer theorem nous dit que la solution de ce problème (sous couvert d'existence) est nécessairement de la forme

$$f = \sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot k(\cdot, x_i)$$

$$\begin{aligned}
&\min_{f \in H} J(f) := \sum_{i=1}^n (y_i - f(x_i))^2 + \lambda ||f||_H^2 \\
\iff &\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^n \Big(y_i - \sum_{j=1}^n \alpha_j \cdot k(x_i, x_j)\Big)^2 + \lambda \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j K(x_i, x_j) \\
\iff &\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} ||y - K\alpha||_2^2 + \lambda \alpha^T K \alpha \text{ avec } K_{ij} := k(x_i, x_j)
\end{aligned}$$

SVM

Dans le cadre d'une SVM, $J(f) := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} max(0, 1 - y_i f(x_i)) + \frac{\lambda}{2}||f||_H^2$. Prenons un kernel k sur X. Encore une fois, le representer theorem nous dit que la seule solution (si elle existe) est sous la forme

$$f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot k(\cdot, x_i)$$

SVM

Dans le cadre d'une SVM, $J(f) := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} max(0, 1 - y_i f(x_i)) + \frac{\lambda}{2}||f||_H^2$. Prenons un kernel k sur X. Encore une fois, le representer theorem nous dit que la seule solution (si elle existe) est sous la forme

$$f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot k(\cdot, x_i)$$

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^{n} max(0, 1 - y_i \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \cdot k(x_i, x_j)) + \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_i a_j K(x_i, x_j)$$

SVM

Dans le cadre d'une SVM, $J(f) := \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} max(0, 1 - y_i f(x_i)) + \frac{\lambda}{2}||f||_H^2$. Prenons un kernel k sur X. Encore une fois, le representer theorem nous dit que la seule solution (si elle existe) est sous la forme

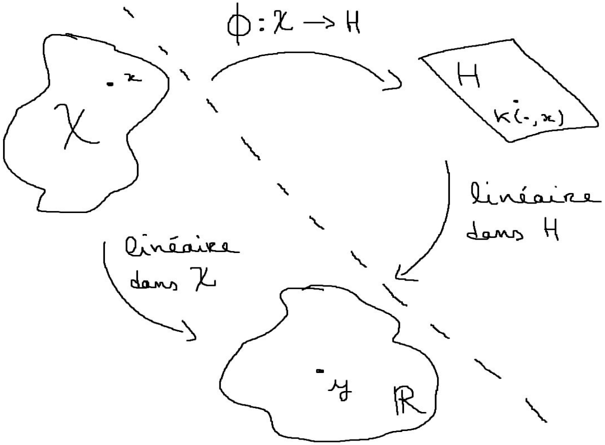
$$f = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \cdot k(\cdot, x_i)$$

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \sum_{i=1}^{n} max(0, 1 - y_i \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \cdot k(x_i, x_j)) + \frac{\lambda}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_i a_j K(x_i, x_j)$$

On peut montrer que le dual de ce problème est :

$$\min_{\gamma \in \mathbb{R}^n} - \sum_{i=1}^{n} \gamma_i + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \gamma_i \gamma_j y_i y_j k(x_i, x_j) \text{ t.q } 0 \leq \gamma_i \leq \frac{1}{n\lambda}, \ \alpha_i = y_i \gamma_i \forall i$$

Visualisation



Apparition des RKHS dans le cas d'un réseau de neurone simple

$\Phi : (\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^{m\times m} \times \mathbb{R}^m) \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ combinaison d'applications linéaires, sans non linéarités intermédiaires :

$$\Phi((\beta, A, u), x) := \frac{1}{m^\alpha}\beta^T\left(\frac{1}{m^\gamma}A\right)ux$$

Apparition des RKHS dans le cas d'un réseau de neurone simple

$\Phi : (\mathbb{R}^m \times \mathbb{R}^{m\times m} \times \mathbb{R}^m) \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ combinaison d'applications linéaires, sans non linéarités intermédiaires :

$$\Phi((\beta, A, u), x) := \frac{1}{m^\alpha}\beta^T \left(\frac{1}{m^\gamma}A\right) ux$$

On initialise $\theta^0 := (\beta^0, A^0, u^0)$ de manière standarde :
$\forall i, j \in \{1, \cdots, m\},\; u_i^0, A_{ij}^0, \beta_i^0 \sim_{iid} N(0,1)$

Apparition des RKHS dans le cas d'un réseau de neurone simple

Posons une fonction de perte $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ t.q $F'(0) \neq 0$. Lorsque $\alpha < 1$, on a pour m grand :

$$||\nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t+1}, x)) - \nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t}, x))|| \ll ||\nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t}, x))||$$

Apparition des RKHS dans le cas d'un réseau de neurone simple

Posons une fonction de perte $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ t.q $F'(0) \neq 0$. Lorsque $\alpha < 1$, on a pour m grand :

$$||\nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t+1}, x)) - \nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t}, x))|| \ll ||\nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t}, x))||$$

$$F(\Phi(\theta^T, x)) = F(\Phi(\theta^0, x)) + \langle \theta^T - \theta^0, \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, x)) \rangle + \mathcal{O}(m^{-1/2})$$

Apparition des RKHS dans le cas d'un réseau de neurone simple

Posons une fonction de perte $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ t.q $F'(0) \neq 0$. Lorsque $\alpha < 1$, on a pour m grand :

$$||\nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t+1}, x)) - \nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t}, x))|| \ll ||\nabla_{\beta/u/A} F(\Phi(\theta^{t}, x))||$$

$$F(\Phi(\theta^T, x)) = F(\Phi(\theta^0, x)) + \langle \theta^T - \theta^0, \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, x)) \rangle + \mathcal{O}(m^{-1/2})$$

On apprend donc un modèle linéaire relatif aux features $\nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, x))$, c'est-à-dire qu'après la transformation $x \to \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, x))$, on est linéaire. On fait donc face à un RKHS de noyau (par définition)

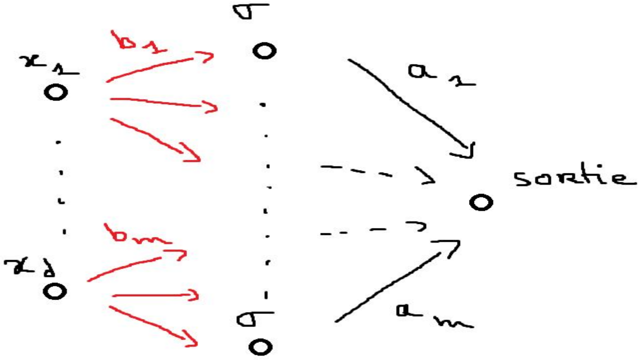
$$k(x, y) = \langle \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, x)), \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, y)) \rangle \xrightarrow{LGN} \mathbb{E}[\langle \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, x)), \nabla_\theta F(\Phi(\theta^0, y)) \rangle]$$

Généralisation à un certain NN

$$\frac{1}{\sqrt{m}}\sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \sigma(\langle \mathbf{b_j}, x\rangle)$$

Généralisation à un certain NN

$$\frac{1}{\sqrt{m}}\sum_{j=1}^{m} a_j \cdot \sigma(\langle \mathbf{b_j}, x\rangle)$$



Généralisation à un certain NN

On considère $f(u) := \sqrt{m}g(u)$ avec

$$g(u) := \frac{1}{m}\sum_{j=1}^{m}\phi(u_j) \text{ et } \phi : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$$

Initialisation : $u_j^0 \sim_{iid} N(0,1)$s

Généralisation à un certain NN

Résultat :

$$f(u^0 + h) \overset{m \to \infty}{\simeq} f(u^0) + ||\mathbb{E}(D\phi(u_j^0)D\phi(u_j^0)^T)||_{op}^{1/2} \langle V_u, h \rangle + \mathcal{O}\left(\frac{||h||^2}{\sqrt{m}}\right)$$

$$\text{avec } V_u := \frac{Dg(u)}{||Dg(u)||_{op}} \text{ de norme 1}$$

Généralisation à un certain NN

Résultat :

$$f(u^0+h) \overset{m\to\infty}{\simeq} f(u^0) + ||\mathbb{E}(D\phi(u_j^0)D\phi(u_j^0)^T)||_{op}^{1/2}\langle V_u, h\rangle + \mathcal{O}\left(\frac{||h||^2}{\sqrt{m}}\right)$$

$$\text{avec } V_u := \frac{Dg(u)}{||Dg(u)||_{op}} \text{ de norme 1}$$

Quand on prend $\phi(u_j^0) = a_j^0 \cdot \sigma(\langle \mathbf{b_j^0}, x\rangle)$

$$f(u^0) = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{j=1}^{m} a_j^0 \cdot \sigma(\langle \mathbf{b_j^0}, x\rangle)$$

Résultats récents

- Un espace de paramètres $\mathbb{R}^p$

Résultats récents

- Un espace de paramètres $\mathbb{R}^p$
- Un espace de Hilbert $\mathcal{F}$

Résultats récents

- Un espace de paramètres $\mathbb{R}^p$
- Un espace de Hilbert $\mathcal{F}$
- Un modèle lisse $h : \mathbb{R}^p \to \mathcal{F}$

Résultats récents

- Un espace de paramètres $\mathbb{R}^p$
- Un espace de Hilbert $\mathcal{F}$
- Un modèle lisse $h : \mathbb{R}^p \to \mathcal{F}$
- Une fonction de perte lisse $R : \mathcal{F} \to \mathbb{R}_+$

Résultats récents

- Un espace de paramètres $\mathbb{R}^p$
- Un espace de Hilbert $\mathcal{F}$
- Un modèle lisse $h : \mathbb{R}^p \to \mathcal{F}$
- Une fonction de perte lisse $R : \mathcal{F} \to \mathbb{R}_+$

On veut minimiser la fonction objectif normalisée $F_\alpha : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}_+$:

$$F_\alpha(w) := \frac{1}{\alpha^2} R(\alpha h(w))$$

pour un certain $\alpha \in \mathbb{R}_+$.

Résultats récents

On définit ensuite le modèle linéarisé autour de l'initialisation w_0 :

$$\bar{h}(w) := h(w_0) + Dh(w_0)(w - w_0)$$

et sa fonction objectif normalisée $\bar{F}_\alpha : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}_+$:

$$\bar{F}_\alpha(w) := \frac{1}{\alpha^2} R(\alpha \bar{h}(w))$$

Résultats récents

On définit ensuite le modèle linéarisé autour de l'initialisation w_0 :

$$\bar{h}(w) := h(w_0) + Dh(w_0)(w - w_0)$$

et sa fonction objectif normalisée $\bar{F}_\alpha : \mathbb{R}^p \to \mathbb{R}_+$:

$$\bar{F}_\alpha(w) := \frac{1}{\alpha^2} R(\alpha \bar{h}(w))$$

Hypothèses : h est différentiable et de différentiel Dh localement Lipschitz (par rapport à la norme opérateur). R est différentiable et de gradient Lipschitz (par rapport à la norme de $\mathcal{F}$).

Résultats récents

On étudie le flot de gradient de F_α, qui est un chemin à temps continu $(w_\alpha(t))_{t\geq 0}$ de paramètres dans $\mathbb{R}^p$ qui veut minimiser F_α, i.e qui résout l'équation différentielle

$$w'_\alpha(t) = -\nabla F_\alpha(w_\alpha(t))$$

avec $w_\alpha(0) = w_0$.

Résultats récents

On étudie le flot de gradient de F_α, qui est un chemin à temps continu $(w_\alpha(t))_{t\geq 0}$ de paramètres dans $\mathbb{R}^p$ qui veut minimiser F_α, i.e qui résout l'équation différentielle

$$w'_\alpha(t) = -\nabla F_\alpha(w_\alpha(t))$$

avec $w_\alpha(0) = w_0$.
On comparera ce flot de gradient avec celui $\bar{w}_\alpha(t))_{t\geq 0}$ de $\bar{F}_\alpha$ qui résout

$$\bar{w}'_\alpha(t) = -\nabla F_\alpha(\bar{w}_\alpha(t))$$

avec $\bar{w}_\alpha(0) = w_0$

Résultats récents

Theorem

Si $h(w_0) = 0$, *alors pour un* $T > 0$, *on a :*

- $\sup_{t\in[0,T]} ||w_\alpha(t) - w_0|| = \mathcal{O}(1/\alpha)$

Résultats récents

Les reproducing kernel Hilbert spaces

Matthieu Denis

RKHS

2-NN

Généralisation

Theorem

Si $h(w_0) = 0$, *alors pour un* $T > 0$, *on a :*

- $\sup_{t\in[0,T]} ||w_\alpha(t) - w_0|| = \mathcal{O}(1/\alpha)$
- $\sup_{t\in[0,T]} ||w_\alpha(t) - \bar{w}_\alpha(t)|| = \mathcal{O}(1/\alpha^2)$

Résultats récents

Theorem

Si $h(w_0) = 0$*, alors pour un* $T > 0$*, on a :*

- $\sup_{t \in [0,T]} ||w_\alpha(t) - w_0|| = \mathcal{O}(1/\alpha)$
- $\sup_{t \in [0,T]} ||w_\alpha(t) - \bar{w}_\alpha(t)|| = \mathcal{O}(1/\alpha^2)$
- $\sup_{t \in [0,T]} ||\alpha h(w_\alpha(t)) - \alpha \bar{h}(\bar{w}_\alpha(t))|| = \mathcal{O}(1/\alpha)$