Optimisation de champ moyen régularisé par l'information de Fisher

Julien CLAISSE ¹ Giovanni CONFORTI ² Zhenjie REN ¹ Songbo WANG ²

¹CEREMADE, Université Paris-Dauphine

²CMAP, École Polytechnique

01/06/2022

- Le problème
- 2 Condition du premier ordre
- 3 La dynamique
- 4 HJB CM
- 5 Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

- 1 Le problème

Motivations

On s'intéresse aux réseaux de neurones.

Cas: une seule couche cachée.

 $i = 1, \ldots, n$ – neurones.

 $\varphi: \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ – fonctions d'activation, e.g. $\varphi(x) = x_+$ (ReLU).

Perte quadratique.

Problème: minimiser

$$F(n, a, b, c) = \mathbf{E}\left[\left|f(Z) - \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}c_{k}\varphi\left(a_{k}Z + b_{k}\right)\right|^{2}\right].$$

Quand $n \to \infty$,

$$F \to \mathbf{E}\left[\left|f(Z) - \mathbb{E}_m\left[C\varphi\left(AZ + B\right)\right]\right|^2\right]$$

où $(A, B, C) \sim m$.

Remarques : F est convexe en m. Ce n'est plus vrai pour réseaux profonds (# couche ≥ 2).

Champ-moyen

On considère une fonction "champ-moyen" générale :

$$F: \mathcal{P}\left(\mathbb{R}^d\right) \to \mathbb{R}.$$

On suppose souvent que F est continue par apport à la distance de Wasserstein.

Régularisation entropique

On fixe une mesure de base. H(m) est l'entropique relative. On considère

$$\inf_{m} F(m) + \frac{\sigma^2}{2} H(m).$$

[Hu, Ren, Šiška, Szpruch, 2019] : la descente de gradient (par apport à Wasserstein) donne la loi marginale de Langevin de champ moyen

$$dX_t = -DF(m_t, X_t) dt + \sigma dW_t, m_t \sim X_t.$$

 m_t converges vers l'unique minimiseur de $F(m) + \frac{\sigma^2}{2}H(m)$.

Régularisation de Fisher

L'information de Fisher :

$$I(m) = \int |\nabla \log m|^2 m dx = 4 \int |\nabla \sqrt{m}|^2 dx.$$

On considère

$$\inf_{m} F(m) + \frac{\sigma^{2}}{4}I(m) = \inf_{m} F^{\sigma}(m).$$

L'espace de probas dont l'information de Fisher est fini :

$$\mathcal{P}_{H}=\left\{m\in\mathcal{P}\left(\mathbb{R}^{d}\right):\sqrt{m}\in\mathcal{H}^{1}\right\}.$$

On suppose toujours que F est convexe dans la suite.

- Le problème
- 2 Condition du premier ordre
- 3 La dynamique
- 4 HJB CM
- Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

Différentiabilité d'une fonction CM

Définition

On dit que $F: \mathcal{P}\left(\mathbb{R}^d\right) \to \mathbb{R}$ est C^1 s'il existe une continue $\frac{\delta F}{\delta m}: \mathcal{P}\left(\mathbb{R}^d\right) \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ t.q. pour tout $m_0, m_1 \in \mathcal{P}$

$$F(m_1) - F(m_0) = \int_0^1 \int \frac{\delta F}{\delta m}(m_t, x) d(m_1 - m_0)(x) dt$$

où
$$m_t = (1-t) m_0 + t m_1, t \in (0,1).$$

Remarques:

- **1** $\frac{\delta F}{\delta m}$ est définie à cste près.
- ② (F est convexe). Si m minimise F, alors $\frac{\delta F}{\delta m}(m,\cdot)$ est cste.

Calculs différentiels de l'information de Fisher

Rappel:

$$I(m) = \int \frac{|\nabla m|^2}{m}.$$

On calcule formellement:

$$\delta I(m) = \int \frac{2\nabla m \cdot \nabla \delta m}{m} - \frac{|\nabla m|^2}{m^2} \delta m$$
$$= \int \left(-2\nabla \cdot \left(\frac{\nabla m}{m}\right) - \frac{|\nabla m|^2}{m^2}\right) \delta m.$$

Donc

$$\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} = \frac{\delta F}{\delta m} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla m}{m}\right) - \frac{\sigma^2}{4} \frac{\left|\nabla m\right|^2}{m^2}.$$

Pour tout rendre rigoureux...

Théorème

Si $m \in \mathcal{P}_H$ est t.q. $m \in L^{\infty}$, $m^{-1} \in L^{\infty}_{loc}$, et

$$\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m}(m,\cdot) = \frac{\delta F}{\delta m}(m,\cdot) - \frac{\sigma^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{\nabla m}{m}\right) - \frac{\sigma^2}{4} \frac{|\nabla m|^2}{m^2} = cste$$

au sens de distribution, alors m est l'unique minimiseur de F^{σ} .

Théorème

Si $m, m' \in \mathcal{P}_H \cap L^\infty$ et que $m^{-1} \in L^\infty_{loc}$. (Une certaine croissance de m, m'.) Alors

$$F^{\sigma}\left(m'\right)-F^{\sigma}\left(m\right)\geq\int\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m}\left(m,x\right)\left(m'-m\right)dx.$$

- Le problème
- 2 Condition du premier ordre
- 3 La dynamique
- 4 HJB CM
- Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

Observations

Notons $\psi = \sqrt{m}$. La condition du premier ordre est équivalente à

 ψ est une fonction propre de l'opérateur de Schrödinger CM

$$\sigma^2\Delta - \frac{\delta F}{\delta m}(m,\cdot).$$

Observations

Notons $u = -\log m$. La condition du premier ordre est équivalente à

$$cste = \frac{\delta F}{\delta m} + \frac{\sigma^2}{2} \Delta u - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla u|^2.$$

C'est une équation HJB CM associée à un problème de contrôle ergodique.

Définition de la dynamique

On définit la dynamique :

$$\partial_t m_t = -\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_t, \cdot) m_t$$

où $\frac{\delta F}{\delta m}$ est choisie t.q. $\int \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m, x) dm = 0$.

"Sanity check": $\partial_t \langle \mathbf{1}, m_t \rangle = 0$. Conservation de masse.

Formellement F^{σ} est décroissante :

$$\frac{dF^{\sigma}\left(m_{t}\right)}{dt}=-\int\left|\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m}\left(m_{t},\cdot\right)\right|^{2}dm_{t}$$

On peut espérer que $m_t o$ minimiseur.

Formulations équivalentes

La dynamique en ψ :

$$\partial_t \psi_t = \frac{\sigma^2}{2} \Delta \psi_t - \frac{1}{2} \frac{\delta F}{\delta m} (m_t, \cdot) \psi_t$$

Schrödinger dynamique CM
 La dynamique en u:

$$\partial_t u = \frac{\sigma^2}{2} \Delta u - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla u|^2 + \frac{\delta F}{\delta m} (m_t, \cdot)$$

HJB dynamique CM

- Le problème
- Condition du premier ordre
- La dynamique
- 4 HJB CM
- Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

Hypothèses

F est continue par apport à \mathcal{W}_1 et convexe. $F \in \mathcal{C}^1$ et sa dérivée $\frac{\delta F}{\delta m}$ peut se décomposer

$$\frac{\delta F}{\delta m}(m,x) = g(x) + G(m,x)$$

οù

- $\bullet \ \kappa \operatorname{id} \leq \nabla^2 g \leq C\operatorname{id};$
- ② G est uniformément Lipschitzienne en x: $\sup_m \|\nabla G(m,\cdot)\|_{\infty} \leq L_{G}$.
- **3** ∇G est Lipschitzienne en $m, x : \forall m, m', x, x'$

$$\left|\nabla G(m,x)-\nabla G(m',x')\right|\leq L_{G}\left(W_{1}\left(m,m'\right)+\left|x-x'\right|\right).$$

Décomposition

$$\partial_t u = \frac{\sigma^2}{2} \Delta u - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla u|^2 + \frac{\delta F}{\delta m} (m_t, \cdot)$$
$$= \frac{\sigma^2}{2} \Delta u - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla u|^2 + g + G(m_t, \cdot)$$

On veut décomposer la fonction valeur u = v + w où v, w résolvent résp.

$$\partial_t v = \frac{\sigma^2}{2} \Delta v - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla v|^2 + g$$

$$\partial_t w = \frac{\sigma^2}{2} \Delta w - \frac{\sigma^2}{2} \nabla v \cdot \nabla w - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla w|^2 + G(m_t, \cdot)$$

Convexité de v

$$\partial_t v = \frac{\sigma^2}{2} \Delta v - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla v|^2 + g.$$

L'équation est classique. On a l'existence et l'unicité du problème de valeur initiale. De plus, on a

Proposition

Si $v_0 = v(0,\cdot)$ est θ_0 -convexe, alors $v_t = v(t,\cdot)$ est θ_t -convexe où θ_t résout

$$\frac{d\theta_t}{dt} = \kappa - \frac{\sigma^2}{2}\theta_t^2$$

Heuristiques:

$$\partial_t \nabla^2 v = \frac{\sigma^2}{2} \Delta \nabla^2 v - \frac{\sigma^2}{2} \nabla v \cdot \nabla \nabla^2 v - \frac{\sigma^2}{2} \nabla^2 v \nabla^2 v + \nabla^2 g$$

Estimée a priori de w

Proposition

On suppose que w résout classiquement sur [0, T]

$$\partial_{t}w = \frac{\sigma^{2}}{2}\Delta w - \frac{\sigma^{2}}{2}\nabla v \cdot \nabla w - \frac{\sigma^{2}}{4}\left|\nabla w\right|^{2} + L(t,x)$$

où L est uniformément Lipschitzienne en x et la valeur initiale $w_0 = w(0,\cdot)$ est aussi Lipschitzienne. On suppose de plus que $w, \nabla w$ sont à croissance polynomiale. Alors w est uniformément Lipschitzienne en x, dont la constante peut être indépendante de T.

Estimée a priori de w : preuve

$$\partial_{t}w = \frac{\sigma^{2}}{2}\Delta w - \frac{\sigma^{2}}{2}\nabla v \cdot \nabla w + \frac{\sigma^{2}}{2}\inf_{\alpha}\left\{-\alpha \cdot \nabla w + \frac{1}{2}\left|\alpha\right|^{2}\right\} + L(t, x)$$

On applique le théorème de vérification pour retrouver la rep. contrôle sto :

$$w(t,x) = \inf_{\alpha} \mathbb{E} \left[\int_0^t L(t-s,X_s) + \frac{\sigma^2}{4} |\alpha_s|^2 ds + w(0,X_t) \right]$$
$$dX_s = -\frac{\sigma^2}{2} (\alpha_s + \nabla v_{t-s}(X_s)) ds + \sigma dW_s, \quad X_0 = x$$

L'infimum est atteint par $\alpha_s^* = \nabla w_{t-s}(X_s)$.

On définit X' partant de x', avec le contrôle optimal pour x, en utilisant le même BM :

$$w(t,x') \leq \mathbb{E}\left[\int_{0}^{t} L(t-s,X'_{s}) + \frac{\sigma^{2}}{4} |\alpha_{s}|^{2} ds + w(0,X'_{t})\right]$$
$$dX'_{s} = -\frac{\sigma^{2}}{2} (\alpha_{s} + \nabla v_{t-s}(X'_{s})) ds + \sigma dW_{s}, \quad X'_{0} = x'$$

Estimée a priori de w : preuve

$$d\left(X_{s}-X_{s}'\right)=-\frac{\sigma^{2}}{2}\left(\nabla v_{t-s}\left(X_{s}\right)-\nabla v_{t-s}\left(X_{s}'\right)\right)ds$$

 v_s est θ_s -convexe. Alors

$$\left|X_s - X_s'\right| \le C e^{-cs} \left|x - x'\right|$$

Soustraire les reps. de w(t,x), (w(t,x'):

$$\begin{split} w(t,x) - w\left(t,x'\right) &\leq \mathbb{E}\left[\int_{0}^{t} L\left(t-s,X_{s}\right) - L\left(t-s,X_{s}'\right) ds \right. \\ &\left. + w(0,X_{t}) - w\left(0,X_{t}'\right)\right] \\ &\leq \mathbb{E}\left[\int_{0}^{t} \left\|L\right\|_{\mathsf{Lip}} \left|X_{s} - X_{s}'\right| ds + \left\|\nabla w_{0}\right\|_{\infty} \left|X_{t} - X_{t}'\right|\right] \\ &\leq C\left|x-x'\right| \end{split}$$

Couplage de réflexion

Théorème (Eberle, 2011)

Soient $b_1, b_2 : \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ où b_1 est strictement décroissant:

$$(x-y)\cdot(b_1(x)-b_1(y)) \le -\theta |x-y|^2$$

et b_2 est borné. $b=b_1+b_2$. Si la diffusion $dX_t=b(X_t)\,dt+dW_t$ n'explose pas, alors il existe cstes c, C t.q. pour toutes lois marginales m_t,m_t' de la diffusion dont $m_0=\delta_x,m_0'=\delta_{x'}$, on a

$$W_1\left(m_t,m_t'\right) \leq Ce^{-ct}\left|x-x'\right|.$$

Caractère bien posé

$$\partial_t w = \frac{\sigma^2}{2} \Delta w - \frac{\sigma^2}{2} \nabla v \cdot \nabla w - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla w|^2 + G(m_t, \cdot)$$

Par contre, cette équation n'est pas classique. On doit montrer à la main qu'elle est bien posée.

Considérons la suite d'applications $w \mapsto m \mapsto \bar{w}$, où

$$m_t = \exp(-v_t - w_t)$$

$$\partial_t \bar{w} = \frac{\sigma^2}{2} \Delta \bar{w} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla v \cdot \nabla \bar{w} - |\nabla \bar{w}|^2 + G(m_t, \cdot)$$

On mesure la différence entre w,w' par $\sup_{t\in[0,T]}\|\nabla w - \nabla w'\|$. Avec la normalisation c'est une vraie norme.

On veut que l'application composée $w\mapsto \bar w$ soient une contraction pour T petit.

$w \mapsto m$

Soient $\bar{m}_t = \exp(-v_t - w_t)$, $\bar{m}' = \exp(-v_t - w_t')$. \bar{m}_t est la mesure invariante de diffusion

$$dX_{h} = -\nabla v_{t}(X_{h}) dh - \nabla w_{t}(X_{h}) dh + \sqrt{2}dW_{t}$$

et pareil pour \bar{m}' . On utilise encore la méthode de réflexion pour construire un couplage t.q.

$$W_{1}\left(\bar{m}_{t}, \bar{m}'_{t}\right) \leq C\mathbb{E}\left[\int_{0}^{\infty} e^{-ch}\left|\nabla w_{t}\left(X_{h}\right) - \nabla w'_{t}\left(X_{h}\right)\right|\right] dh$$

$$\leq C\left\|\nabla w_{t} - \nabla w'_{t}\right\|.$$

$$m\mapsto \bar{w}$$

Soient $m, m' \in C([0, T]; W_1)$. Notons $\delta \bar{w} = \bar{w} - \bar{w}'$. $\delta \bar{w}$ satisfait

$$\partial_t \delta \bar{w} = \frac{\sigma^2}{2} \Delta \delta \bar{w} - \frac{\sigma^2}{2} \nabla v \cdot \nabla \delta \bar{w} - \frac{\sigma^2}{2} \left(\nabla \bar{w} + \nabla \bar{w}' \right) \cdot \nabla \delta \bar{w} + G - G'$$

On a représentation probabiliste

$$\delta \bar{w}(t,x) = \mathbb{E}\left[\int_0^t (G - G')(t - s, X_s) ds + \delta \bar{w}(0, X_t)\right]$$

$$dX_s = -\frac{\sigma^2}{2} \nabla v(t - s, X_s) - \frac{\sigma^2}{2} (\nabla \bar{w} + \nabla \bar{w})(t - s, X_s) + \sigma dW_s, s \leq t$$

$$X_0 = x.$$

Observons que le drift de $X=\theta_{t-s}$ -monotone + borné. On utilise le couplage de réflexion pour trouver un X' partant de x', satisfaisant l'équation de diffusion t.q. $\mathbb{E}\left|X_s-X_s'\right| \leq C|x-x'|$.

$$\sup_{t \in [0,T]} \left\| \delta \nabla \bar{w} \big(t,\cdot \big) \right\|_{\infty} \leq CT \sup_{t \in [0,T]} \mathcal{W}_1 \left(m_t, m_t' \right) + C \left\| \delta \nabla \bar{w} \big(0,\cdot \big) \right\|_{\infty}.$$

◆ロト ◆母ト ◆差ト ◆差ト 差 めなぐ

- Le problème
- Condition du premier ordre
- 3 La dynamique
- 4 HJB CM
- Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

Preuve rigoureuse

On veut rendre rigoureux la formule suivante

$$\frac{dF^{\sigma}\left(m_{t}\right)}{dt}=-\int\left|\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m}\left(m_{t},x\right)\right|^{2}m_{t}dx.$$

Outil: convexité, convergence dominée.

Convexité:

$$\int \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_{t+h}, x) (m_{t+h} - m_t) dx \ge F^{\sigma} (m_{t+h}) - F^{\sigma} (m_t)$$

$$\ge \int \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_t, x) (m_{t+h} - m_t) dx$$

où m_t résout la dynamique classiquement, i.e.

$$m_{t+h} - m_t = -\int_0^h \int \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_{t+r}, x) m_{t+r} dx dr.$$

Intégrabilité

Pour appliquer convergence dominée, on a besoin de

Rappel:

$$\frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} = \frac{\delta F}{\delta m} + \frac{\sigma^2}{2} \Delta u - \frac{\sigma^2}{4} |\nabla u|^2$$

A noter que :

- On peut prouver classiquement (Bernstein, "turnpike") $\sup_t |\nabla v(x)| \le C(1+|x|);$
- $\nabla u = \nabla v + \nabla w$ dont ∇v est à croissant linéaire, ∇w borné;
- $m_t = \exp(-v_t w_t)$. On peut utiliser concentration pour montrer que $\int |x|^p m_t dx < C_p$ pour tout $p \ge 1$.

Il nous reste à borner Δu .



Estimée sur $\nabla^2 u$: couplage de réflexion

 ∇u résout

$$\partial_t \nabla u = \frac{\sigma^2}{2} \Delta \nabla u - \frac{\sigma^2}{2} \nabla u \cdot \nabla^2 u + \nabla \frac{\delta F}{\delta m}$$

Représentation probabiliste:

$$\nabla u(t,x) = \mathbb{E}\left[\int_0^t \nabla \frac{\delta F}{\delta m}(m_{t-s}, X_s) + \nabla u(0, X_t)\right]$$
$$dX_s = -\sigma^2 \nabla u(t-s, X_s) ds + \sigma dW_s$$
$$= -\sigma^2 (\nabla v + \nabla w) (t-s, X_s) ds + \sigma dW_s$$

 $\label{eq:definition} \begin{aligned} \text{Drift} &= \text{monotone} + \text{born\'e}. \ \text{On utilise le couplage de r\'eflexion pour} \\ \text{trouver une proba t.q. } &(\textit{X}' \text{ la m\'eme diffusion dont le point de d\'epart est } \textit{x}') \end{aligned}$

$$\mathbb{E}\left|X_{s}-X_{s}'\right|\leq Ce^{-cs}\left|x-x'\right|.$$

Donc ∇u est uniformément Lipschitz en x, i.e. $\sup_t \left\| \nabla^2 u_t \right\|_{\infty} < +\infty$.

- Le problème
- Condition du premier ordre
- 3 La dynamique
- 4 HJB CM
- Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

Preuve

$$\mathcal{K} := \left\{ \left(m, \sqrt{m} \right) : \int |x|^2 m + \left| \nabla \sqrt{m} \right|^2 dx \leq C \right\}.$$

Il est connu que $\mathcal K$ est $\mathcal W_1 \otimes \mathsf{faible} ext{-}H^1$ compact.

 $\left(m_t,\sqrt{m_t}
ight)\in\mathcal{K}$ pour un certain $\emph{C}.$

 $\exists \left(\hat{m}, \sqrt{\hat{m}}\right)$ un point d'accumulation de $\left(m_{t_k}, \sqrt{m_{t_k}}\right)$ pour $t_k \to \infty$.

L'énergie est décroissante et finie. Elle ne peut pas décroître infiniment.

$$\frac{dF^{\sigma}(m_t)}{dt} = -\int \left| \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m}(m_t, x) \right|^2 m_t dx.$$

Il existe une suite $h_i \downarrow 0$ t.q.

$$\int \left| \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} \left(m_{t_k + h_j}, x \right) \right|^2 m_{t_k + h_j} dx \to 0.$$

On prétends que $h_i = 0$ dans la suite.



Preuve (suite)

Pour tout $m \in L^{\infty}$,

$$F^{\sigma}(m_{t_{k}}) \leq F^{\sigma}(m) + \int \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_{t_{k}}, x) (m - m_{t_{k}}) dx$$

$$\leq F^{\sigma}(m) + \int_{K} \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_{t_{k}}, x) (m - m_{t_{k}}) dx + \varepsilon$$

$$\leq F^{\sigma}(m) + \varepsilon + \left(\int_{K} \left| \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} (m_{t_{k}}, x) \right|^{2} m_{t_{k}} dx \right)^{1/2} \left(\int_{K} \frac{(m - m_{t_{k}})^{2}}{m_{t_{k}}} \right)^{1/2}$$

On peut prouver que $m_{t_k}^{-1} \in L_{loc}^{\infty}$. Donc

$$F(\hat{m}) \leq \liminf F^{\sigma}(m_{t_k}) \leq F^{\sigma}(m)$$
.

Puis approcher *m* quelconque par des mesure borné et conclure.

- Le problème
- Condition du premier ordre
- 3 La dynamique
- 4 HJB CM
- Décroissance d'energie
- 6 Convergence
- Descente de gradient

GD à la JKO (heuristiques)

On mesure la distance entre mesures par l'entropie relative. A chaque étape,

$$m_{k+1} = \operatorname{arg\,min}_m h^{-1} H(m|m_k) + F^{\sigma}(m)$$

Calculs du premier ordre formels:

$$0 = h^{-1}\delta \int \log \frac{m}{m_k} m + \delta F^{\sigma}(m)$$
$$= h^{-1} \int \log \frac{m}{m_k} \delta m + \int \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m}(m, \cdot) \delta m$$

de sorte que

$$m_{k+1} = \frac{m_k}{Z_k} \exp\left(-h \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} \left(m_{k+1}, \cdot\right)\right) \approx m_k \left(1 - h \frac{\delta F^{\sigma}}{\delta m} \left(m_{k+1}, \cdot\right)\right).$$

On espère $m_{kh} \rightarrow m_t$ quand $h \rightarrow 0$.



Conclusions

- Problème d'optimisation champ-moyen avec Fisher, FOC
- Oynamique (Schrödinger CM, HJB CM, GD entropie-Fisher)
- Convergence (pas de vitesse, encore...)
- Pas du tout de numérique