Neural tangent kernelのHGMによる計算 超幾何 関数による 計算 A-Sakoda, N. Takayama arxiv: 2410,23626 下81. 予備知識 Neural net (NN) ZIZ? Kernel 法 zit? 基本定理 $\left(\frac{30}{3t}(x),\frac{30}{3t}(x')\right) = : K(x,x')$ $\longrightarrow (\mathcal{H}(\mathcal{X},\mathcal{X}'))$ 5. 至2, 田の定義 dual activation related works, on dual activation S. §3. HGMI=J3 dual activation の言下與法. 計算実験 T. § 4. Closed formula, by HG. ft.

81. 亭備知識 NN f(0,2) ~17? $\mathbb{R}^{d_{n}} \longrightarrow \mathbb{R}^{d_{n+1}} \longrightarrow \mathbb{R}^{d_{n+1}}$ affine ties to bies to これを含成したもの、「り」「「いり」 を f(0, 2) のは Wやらなてい。 学習では?補関、ReLU 入力データ J(⁽¹⁾, X⁽¹⁾, …,)(^(N) 出カデータ Y(1), Y(2)、、, Y(M) ER から、パラメータのをまめること、

Nº 5×-9をきめる Kernel 法とは f(0,2)とは? 1950, 1990~ di+1 97 R^d~ E kernel ft 12. 90 $K(x, \chi') = \langle$ affine 成的每に f(0,x)=0. fixed. 14702 $\left(\frac{1}{2} \right) + \left(\frac{1}{2} \right)$ A activation $\mathcal{X} = \mathcal{O} \cdot \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial \mathcal{O}}(\mathcal{O}_0, \mathcal{X})$ Ŵ 佑王 つまり 一, 末知. $\Theta = \sum_{\hat{j}=1} \alpha_{j} \frac{\partial f}{\partial \Theta} (\Theta_{0}, \chi^{(i)})$ 2131 $y \mapsto a(y_2)$ $x_{j} \in \mathbb{R}$ これを含成したもの $f(0,x) = \sum_{i=1}^{n} d_i K(\chi^{(i)},\chi)$ を f(0, 2) のは いやりなてい e_X , $\alpha(v) = max(u, 0) = u_X(u)$ 学習之际? 補関 loss ft RelV $\mathcal{L}(\mathcal{A}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} \left(\sum_{j=1}^{N} \mathbb{K}_{kj} \mathcal{A}_{j} - \mathcal{Y}^{(k)} \right)^{2}$ $\mathcal{L}^{(1)}, \mathcal{L}^{(2)}, \cdots, \mathcal{L}^{(\mathcal{W})}$ 入カデータ y", y", -, yw eR $K_{\lambda j} = K(\chi^{(\lambda)}, \chi^{(\lambda)})$ 出カデータ から、パラメータのをまめること $\sum_{i=1}^{n} \left| \left\langle \lambda_{ij} \right\rangle d_{ij} - \mathcal{Y}^{(\lambda)} \right\rangle$ (Kib) K~~~ やっこ ダ オンベナノンを作

$$\frac{1}{2} \sqrt{3} \times \sqrt{3} \times$$

定理: Jacot et al 2018^a. NN の幅が $d_i \rightarrow \infty$ ならほと んどすべての θ について $K(x, x') \sim \Theta(x, x')$ となる.

^ahttps://arxiv.org/abs/1806.07572

ネットの記事など¹. Θ (NTK) の定義.

$$\Sigma^{(0)}(x, x') = x^T x' + \beta^2,$$
(3)

$$\Lambda^{(h)}(x,x') = \begin{pmatrix} \Sigma^{(h-1)}(x,x) & \Sigma^{(h-1)}(x,x') \\ \Sigma^{(h-1)}(x',x) & \Sigma^{(h-1)}(x',x') \end{pmatrix}$$
(4)

$$\Sigma^{(h)}(x,x') = c_{\sigma} E_{(u,v) \sim N(0,\Lambda^{(h)})}[\sigma(u)\sigma(v)] + \beta^2$$
(5)

$$\dot{\Sigma}^{(h)}(x,x') = c_{\sigma} E_{(u,v) \sim N(0,\Lambda^{(h)})}[\dot{\sigma}(u)\dot{\sigma}(v)]$$
(6)

$$\Theta(x,x') = \Theta^{(L)}(x,x') = \sum_{h=1}^{L+1} \left(\Sigma^{(h-1)}(x,x') \prod_{h'=h}^{L+1} \dot{\Sigma}(x,x') \right)$$
(7)

¹https://oumpy.github.io/blog/2020/04/neural_tangents.html = $\circ \circ \circ \circ$ 3/10 $E_{(u,v) \sim N(0,\Lambda^{(h)})}[\sigma(u)\sigma(v)]$ (dual activation of σ) は積分で書くと

$$\hat{E}[\sigma(u)\sigma(v)] = \int_{\mathbb{R}^2} \sigma(u)\sigma(v) \exp(x_{11}u^2 + 2x_{12}uv + x_{22}v^2) dudv \quad (8)$$

$$E_{(u,v)\sim N(0,\Lambda^{(h)})}[\sigma(u)\sigma(v)] = \hat{E}[\sigma(u)\sigma(v)]\frac{\sqrt{\det(x)}}{\pi}, \quad \Lambda^{(h)} = -\frac{1}{2}x^{-1}.$$
(9)

• ReLU (rectified linear unit)²: $\sigma(u) = uY(u)$, Y(u) Heaviside 関数.

- Sigmoid: $\sigma(u) = \frac{1}{1 + \exp(-u)}$
- GeLU (Gaussian error linear unit): $\sigma(u) = \frac{1}{2} \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{u}{\sqrt{2}} \right) \right)$

dual activation が計算できれば NTK が計算できる

Dual activation の方法はいろいろ研究されている. 計論

・ ReLU については具体的に次の式が知られている. A を $\begin{pmatrix} c_1^2 & c_1c_2r \\ c_1c_2r & c_2^2 \end{pmatrix}, c_1, c_2 \ge 0, |r| \le 1$ とすると,

$$E_{(u,v)\sim N(0,\Lambda)}[\sigma(u)\sigma(v)] = \frac{r(\pi - \arccos(r)) + \sqrt{1 - r^2}}{2\pi} \cdot c_1 c_2 \quad (10)$$

$$E_{(u,v)\sim N(0,\Lambda(h))}[\dot{\sigma}(u)\dot{\sigma}(v)] = \frac{\pi - \arccos(r)}{2\pi}$$
(11)

 Han et al arxiv:2209.04121 は一般的な計算法として
 Gauss-Hermite quadrature を用いる方法を与えているほか, 多項 式の場合の dual activation を与えている.

 その他の activation に対する研究も Han et al の論文にまとめ られている. activation が 多項式係数の線形常微分方程式の解の時に dual activation を計算する一般的アルゴリズムを与えた。

Algorithm 1

(Holonomic Gradient Method, HGM) *Input:* $\sigma_1(u) \geq \sigma_2(u)$ を零化する線型 *ODE* ℓ_1 , ℓ_2 . *Output:* $\hat{E}[\sigma_1(u)\sigma_2(v)]$ の値 (*NTK* のときは $\sigma_1 = \sigma_2$).

- 1. $\ell_1 \geq \ell_2$ が C $\langle u, v, \partial_u, \partial_v \rangle$ で生成する左イデアルに小山-竹村 *Th2 [arxiv:1211.6822]* を適用して *Holnomic* イデアル $l_1 \in D_5 = C\langle x_{11}, x_{12}, x_{22}, y_1, y_2, \partial_{11}, \partial_{12}, \partial_{22}, \partial_1, \partial_2 \rangle$ を得る.
- 制限アルゴリズム [Oaku 1997]を用いて
 h₂ := (h₁ + y₁D₅ + y₂D₅) ∩ C⟨x₁₁, x₁₂, x₂₂, ∂₁₁, ∂₁₂, ∂₂₂⟩ の生成 元を見つける.
- 3. *I*₂ を *Pfaffian* 系に書く.
- 初期値として F の x₁₁ = −1, x₁₂ = 0, x₂₂ = −1 またはその周 りの点での値を級数展開などを使って評価する.
- 5. Pfaffian 系を数値的に解く

$$\int_{\mathsf{R}^2} uY(u)vY(v) \exp(x_{11}u^2 + 2x_{12}uv + x_{22}v^2 + y_1u + y_2v) dudv$$

小山-竹村 2012 はこの積分の微分方程式を求める方法を与えている.

• $\hat{E}[\sigma_1(u)\sigma_2(v)]$ の $(x_{11}, x_{12}, x_{22}) = (-1, 0, -1)$ 周りでの級数展 開は $\sum_{k \in \mathbb{N}_0^3} c_k x^k$, $x^k = (x_{11} + 1)^{k_{11}} x_{12}^{k_{12}} (x_{22} + 1)^{k_{22}}$ として

$$c_{k} = \frac{2^{k_{12}}}{k_{11}!k_{12}!k_{22}!} \times \int_{-\infty}^{\infty} u^{2k_{11}+k_{12}}\sigma_{1}(u)\exp(-u^{2})du \times \int_{-\infty}^{\infty} v^{2k_{22}+k_{12}}\sigma_{2}(v)\exp(-v^{2})dv.$$
(12)

これを使って初期値を評価する.

[st-2024] アルゴリズムの流れ (ReLU の場合)

$$\int_{\mathbb{R}^2} uY(u)vY(v) \exp(x_{11}u^2 + 2x_{12}uv + x_{22}v^2 + y_1u + y_2v) dudv$$

は

$$\partial_1(-y_1 - 2(x_{11}\partial_1 + x_{12}\partial_2)) - 1,$$
 (13)

$$\partial_2(-y_2 - 2(x_{12}\partial_1 + x_{22}\partial_2)) - 1,$$
 (14)

$$\partial_{12} - 2\partial_1\partial_2,$$
 (15)

$$\partial_{11} - \partial_1^2,$$
 (16)

$$\partial_{22} - \partial_2^2,$$
 (17)

<u>を満たす ($\partial_{ij} = \partial/\partial x_{ij}, \partial_i = \partial/\partial y_i$)</u>. 生成する左イデアルを I_1 . ³https://arxiv.org/abs/1211.6822 積分を y₁ = y₂ = 0 に制限した関数の満たす方程式は

$$I_{2} = (I_{1} + y_{1}D + y_{2}D) \cap C\langle x_{11}, x_{12}, x_{22}, \partial_{11}, \partial_{12}, \partial_{22} \rangle$$

ここで $D = C\langle y_1, y_2, x_{11}, x_{12}, x_{22}, \partial_1, \partial_2, \partial_{11}, \partial_{12}, \partial_{22} \rangle$. • 素手の制限計算, たとえば

$$-y_1\partial_1 - 1 - 2(x_{11}\partial_1^2 + x_{12}\partial_1\partial_2) - 1$$

$$\rightarrow -y_1\partial_1 - 2(x_{11}\partial_{11} + (1/2)x_{12}\partial_{12}) - 1 - 1, \quad \text{by (12) and (13).}$$

$$g(x) = \hat{E}[\sigma(u)\sigma(v)](x), \ \sigma = \text{ReLU} \, \overset{i}{n}$$

$$2x_{11}\partial_{11} + x_{12}\partial_{12} + 2, \\ x_{12}\partial_{12} + 2x_{22}\partial_{22} + 2, \\ 4\partial_{11}\partial_{22} - \partial_{12}^2$$

$$F = (1, \partial_{12})^T \bullet g.$$
$$\partial_{x_{11}} \bullet F - P_{11}F = 0, \partial_{x_{12}} \bullet F - P_{12}F = 0, \partial_{x_{22}} \bullet F - P_{22}F = 0$$

$$P_{11} = \begin{pmatrix} \frac{-1}{x_{11}} & \frac{-\frac{1}{2}x_{12}}{x_{11}} \\ \frac{2x_{12}}{x_{11}(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} & \frac{1}{2}(2x_{12}^2 + 3x_{22}x_{11}) \\ \frac{1}{x_{11}(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} & \frac{1}{x_{11}(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} \end{pmatrix},$$

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{-4}{x_{12}^2 - x_{22}x_{11}} & \frac{-5x_{12}}{(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} \end{pmatrix},$$

$$P_{22} = \begin{pmatrix} \frac{-1}{x_{22}} & \frac{-\frac{1}{2}x_{12}}{x_{22}} \\ \frac{2x_{12}}{x_{22}(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} & \frac{1}{2}(2x_{12}^2 + 3x_{22}x_{11})} \\ \frac{1}{x_{22}(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} & \frac{1}{x_{22}(x_{12}^2 - x_{22}x_{11})} \end{pmatrix}.$$

 $F(-1,0,-1)=(1/4,\pi/8)^T$. scipy, solve_ivp.

- import("nk_restriction.rr");;
- 2 V=[y1,y2,x11,x12,x22]; DV=poly_dvar(V);
- ³ P1=poly_dmul(dy1,-y1-2*x11*dy1-2*x12*dy2,V)-1;
- 4 P2=poly_dmul(dy2,-y2-2*x12*dy1-2*x22*dy2,V)-1;
- ⁵ I=[P1,P2,dx11-dy1²,dx22-dy2²,dx12-2*dy1*dy2];
- 6 dp_gr_print(1);
- 7 Iprime=nk_restriction.restriction_ideal(I,V,DV,[1,1,0,0,0])
- 8
- 9 import("yang.rr");;
- 10 VV=[x11,x12,x22]; DVV=poly_dvar(VV);
- yang.define_ring(["partial",VV]);
- 12 RII=map(dp_ptod,Iprime,DVV);
- 13 yang.verbose();
- 14 RG=yang.buchberger(RII);;
- ¹⁵ Std=[1,dx12];
- 16 Pf=yang.pfaffian(map(dp_ptod,Std,DVV),RG);

ReLU $\sigma = uY(u)$

Rank 2 system. 0.196s (Risa/Asir, AMD EPYC 7552 48-Core, 1.5GHz)

Method	Training time	Pred time	
closed	1.500e-2	1.98e-2	
Gauss-Herm	3.352e0	3.306e0	
hgm	8.571e0	1.017e1	
Monte-Carlo	8.597e1	1.149e2	

Kernel error		[Pred error
hgm	2.779e-8	[hgm	2.815e-3
Gauss-Herm	1.034e-3	ſ	Gauss-Herm	4.164e-2
Monte-Carlo	1.103e-3	Ī	Monte-Carlo	4.039e-1



<日 < 三 > < 三 > < 三 > 三 の < で 12/10 MNIST に含まれる画像の例

۱. / ч ¥ F Ч Π \mathbf{r} С в ₽ ନ q Ð q

MNIST

MNIST 手書き文字データの 0 と 1 の画像に対して計算した結果. 訓練データは 100 件, テストデータは 20 件 Intel(R) Xeon(R) Gold 6426Y (800MHz) and NVIDIA A800 40GB.

Method	Eval time	Kernel error
closed	2.702e0	
Gauss-Herm	1.280e2	6.596e-2
hgm	1.727e2	1.456e-6
Monte-Carlo	2.904e3	1.814e-2

hgm-ntk の実装

- ●の計算と Pfaffian の数値解析に工夫が必要
- 与えられた N 個のデータに対して (x_i, x_j), i, j = 1,..., N の内 積を計算して記憶する
- 計算した内積から適切なものを選んで来て共分散行列を作りまた記憶しておく
- 共分散行列が退化しているか、それに近い状態のときは HGM を使えないので除く(数値積分で期待値を計算する)
- 残った共分散行列を HGM の入力とするが、さらに3次元の点として見たときの距離が近すぎると ODE Solver が上手く動かないのでこれも除く(十分近い点の値をそのまま期待値として採用する)

カーネル法はデータの件数 N に対して N² 回の計算が必要なの
 で高速化の工夫が必要

例えばデータの次元を M,X をデータを並べた N × M 行列とするとデータの内積を取る部分は行列で

XX^T

とかける.

 これは GPU によってかなり高速化ができるので MNIST の実験 では GPU を使っている.

MNIST の実験では他に HGM の入力を作る部分も GPU を使っている

まとめ

- Holonomic 関数であれば計算代数のアルゴリズムを使って NTK の近似計算ができる.
- 滑らかでないが Holonomic な活性化関数に対して有効な手法に なり得る.

§4 closed formula. 問題 dual activation 专择3年関数2~ ならわせ、 (用の高速高精度計算 Han et al 2022. arxiv: 2209.04121

Activation	$\sigma(t)$	Reference for the NNGP	Reference for the NTK
Rectified monomials	$t^q \cdot \mathbb{1}_{\{t \ge 0\}}$	[44]	[44]
Error function	$\operatorname{erf}(t)$	[43]	[5]
ABReLU (Leaky ReLU)	$-A\min(t,0) + B\max(t,0)$	[50, 51, 42]	[50, 51, 42]
Exponential	$\exp(At)$	[52, 46]	[52, 46]
Hermite polynomials	$h_q(t)$	[46]	This work
Sinusoidal	$\sin(At+B)$	[45, 47, 53]	This work
Gaussian	$\exp\left(-At^2\right)$	[43]	This work
GeLU	$\frac{t}{2}\left(1+\operatorname{erf}\left(\frac{t}{\sqrt{2}}\right)\right)$	[48]	This work
ELU	$\operatorname{step}(t)t + \operatorname{step}(-t)(e^t - 1)$	[48]	This work
Normalized Gaussian	Unknown	[54]	This work
RBF	$\sqrt{2}\sin(\sqrt{2At}+\frac{\pi}{4})$	[45]	This work
Gabor	$\exp(-t^2)\sin(t)$	This work	This work
Monomial	t^q	This work	This work
Polynomial	$\sum_{j=0}^{q} a_j t^j$	This work	This work

 $f(t) = (2a_jt^{\hat{v}}) Y(t)$? our work.

 $\widehat{E}[\alpha_{1}(u) \alpha_{2}(v)] = \int \alpha_{1}(u) \alpha_{2}(v) \exp[x_{1}u^{2}] \\ = \int \alpha_{1}(u) \alpha_{2}(v) \exp[x_{1}u^{2}] \\ = \int \alpha_{1} e^{-\alpha_{1}} \alpha_{2}(v) \exp[x_{1}u^{2}] \\ = \int \alpha_{1} e^{-\alpha_{1}} \alpha_{2}(v) \exp[x_{1}u^{2}] \\ = \int \alpha_{1}(u) \exp[x_{$ Th. $\widehat{E}\left[u^{m}v^{n}\left(\frac{1}{2}\right)\right] = \left(-2\zeta_{11}\right)^{\alpha}\left(-2\zeta_{12}\right)^{\beta} \times$ $\left(\frac{1}{4} P(\alpha) P(\beta)_{2} F_{1}(\alpha, \beta, \frac{1}{2}; \mathbb{Z})\right)$ $+\frac{1}{2}\left[\left(d+\frac{1}{2}\right)\left[\left(\beta+\frac{1}{2}\right)\int_{\Sigma}Sign(2\zeta_{2})\right]$ $\cdot 2F_1(d+\frac{1}{2},\beta+\frac{1}{2},\frac{3}{2};\epsilon)$ $d = \frac{m+1}{2}, \beta = \frac{n+1}{2}, \beta = \frac{\chi_{12}}{\chi_{11}\chi_{22}}$ $X_{11} < 0, X_{22} < 0 \quad 0 \leq 2 < 1$

$$\begin{split} \widehat{E}\left(\alpha_{1}(u) \alpha_{2}(v)\right) &= \int \alpha_{1}(u) \alpha_{2}(v) \exp[x_{1}u^{2} \\ \mathbb{R}^{2} + 2x_{12}uv + x_{22}v^{2}) du dv \\ \alpha = \alpha_{1} = \alpha_{2}, \quad \alpha \wedge du al \quad a \neq 1 \text{ varion} \\ \text{Th.} \quad \widehat{E}\left[u^{m}v^{n}Y(u)Y(v)\right] = \left(-x_{11}\right)^{\alpha}\left(-x_{12}\right)^{\beta_{n}} \\ \left(\frac{1}{4}\left[\alpha_{1}\right] \sum \left[\alpha_{1}\beta_{1}\beta_{2}\right] + \left(\alpha_{1}\beta_{2}\beta_{2}\beta_{2}\right) + \frac{1}{2}\left[\alpha_{1}\beta_{1}\beta_{2}\right] \sum \left[\alpha_{1}\beta_{2}\beta_{2}\beta_{1}\beta_{1}(x_{12})\right] \\ \cdot \sum \left[\alpha_{1}\beta_{1}\beta_{2}\beta_{2}\beta_{1}\beta_{1}(x_{12})\right] \\ \cdot \sum \left[\alpha_{1}\beta_{1}\beta_{2}\beta_{2}\beta_{2}\beta_{2}\beta_{1}(x_{12})\right] \\ \chi_{11} < 0, \quad x_{12} < 0 \quad 0 \leq 2 < 1 \end{split}$$

Proof sketch.
D IIII-HT科 arxiv 1211.6822
JU Ê(U^m U^m YIN)Y(N) のみたす.
holonomic 幕は

$$\begin{pmatrix} 2 & i & 0 \\ 0 & i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_{i1} \partial_{i1} \\ \chi_{i2} \partial_{i2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m+1 \\ n+1 \end{pmatrix} \\ \chi_{i2} \partial_{i2} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m+1 \\ n+1 \end{pmatrix} \end{pmatrix}$$

 $\begin{pmatrix} 4 & \partial_{11} & \partial_{22} - & \partial_{12} \end{pmatrix}$
2) これは GKZ系 (A+HG)
Series sol は、2F1
3) $\chi_{i2} = 0 \times 37 \times .$ Ê は一重積的6積.
 χ_{0} / 值 T (孫教 E ± M 3.)

Proof sketch.

D 11141-5777 avxiv 1211.6822 EU E(U V YIN)Y(W) ODATES. holonomic 312 $\begin{cases}
\begin{pmatrix}
2 & l & 0 \\
0 & l & 2
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\chi_{ll} \partial_{ll} \\
\chi_{l2} \partial_{l1} \\
\chi_{l2} \partial_{l2} \\
\chi_{l2} \partial_{l2} \\
\end{pmatrix} + \begin{pmatrix} m+l \\
n+l \\
n+l \end{pmatrix}$ $\begin{pmatrix}
4 \partial_{l1} \partial_{22} - \partial_{l2} \\
\chi_{l2} \\
\chi_$ 2) これは、GKZ系 (A-HG) Series sol 17, 2F1 ③ スル=のとないと、Eは一重積的積 その値で係教をきめる。 //

展望. たとえば、 このThを用いると、Qlu)=sinu Y(u) or dual activation は 物変教起発行 超幾何の高速高精度教通言燈 (deep) NTKの計算

 $Y(u)\sin u \mathcal{O}$ dual activation $tt z = \frac{x_{12}^2}{x_{11}x_{22}} \ \mathcal{E} \cup \mathcal{T}$

$$\frac{1}{4}(x_{11}x_{22})^{-1}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(1)_k}{(1/2)_k}z^k{}_1F_1\left(k+1,\frac{3}{2};\frac{1}{4x_{11}}\right){}_1F_1\left(k+1,\frac{3}{2};\frac{1}{4x_{22}}\right)$$
$$+\frac{\pi}{8}(x_{11}x_{22})^{-1}\operatorname{sign}(x_{12})\sqrt{z}\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(3/2)_k}{(1)_k}z^k{}_1F_1\left(k+\frac{3}{2},\frac{3}{2};\frac{1}{4x_{11}}\right){}_1F_1\left(k+\frac{3}{2},\frac{3}{2};\frac{1}{4x_{22}}\right)$$