SD 204 : Lasso

Joseph Salmon
http://josephsalmon.eu
Télécom ParisTech

Plan

Retour sur le modèle

$$\mathbf{y} = X\boldsymbol{\theta}^* + \boldsymbol{\varepsilon} \in \mathbb{R}^n$$

$$X = [\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p] = \begin{pmatrix} x_{1,1} & \dots & x_{1,p} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n,1} & \dots & x_{n,p} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times p}, \boldsymbol{\theta}^* \in \mathbb{R}^p$$

Motivation

Utilité des estimateurs $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ avec beaucoup de coefficients nuls :

- pour l'interprétation
- pour l'efficacité computationnelle si p est énorme

L'idee sous-jacente : **sélectionner des variables**

Rem: D'autant plus si l'on suppose que $\boldsymbol{\theta}^*$ a peu de coefficients non nuls

Méthodes de sélection de variables

- Méthodes de type "**écrémage**" (en :*screening*) : on supprime les $\mathbf{x}_j$ dont la corrélations sont faibles avec $\mathbf{y}$
  • avantages : rapide (+++), coût :p produits scalaires de taille n, intuitive (+++)
  • défauts : néglige les interactions entre variables $\mathbf{x}_j$, résultats théoriques faibles (- - -)
- Méthodes **gloutonnes** ou *pas à pas* (*cf.* Devoir Maison)
  • avantages : rapide (++), intuitive (++)
  • défauts : propagation mauvaises sélections de variables aux étapes suivantes ; résultats théoriques faibles (-)
- Méthodes **pénalisées** favorisant la parcimonie (*e.g.*, Lasso)
  • avantages : résultats théoriques bons (++)
  • défauts : encore lent (on y travaille !) (-),

La pseudo norme ℓ_0

Définition : support et pseudo-norme ℓ_0

Le **support** du vecteur $\boldsymbol{\theta}$ est l'ensemble des indices des coordonnées non nulles :

$$\mathrm{supp}(\boldsymbol{\theta}) = \{j \in [\![1, p]\!], \theta_j \neq 0\}$$

La **pseudo norme** ℓ_0 d'un vecteur $\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p$ est son nombre de coordonnées non-nulles :

$$\|\boldsymbol{\theta}\|_0 = \mathrm{card}\{j \in [\![1, p]\!], \theta_j \neq 0\}$$

<u>Rem</u>: $\|\cdot\|_0$ n'est pas une norme, $\forall t \in \mathbb{R}^*, \|t\boldsymbol{\theta}\|_0 = \|\boldsymbol{\theta}\|_0$
<u>Rem</u>: $\|\cdot\|_0$ n'est pas non plus convexe, $\boldsymbol{\theta}_1 = (1, 0, 1, \cdots, 0)$
$\boldsymbol{\theta}_2 = (0, 1, 1, \cdots, 0)$ et $3 = \|\frac{\boldsymbol{\theta}_1 + \boldsymbol{\theta}_2}{2}\|_0 \geqslant \frac{\|\boldsymbol{\theta}_1\|_0 + \|\boldsymbol{\theta}_2\|_0}{2} = 2$

Sommaire

La pénalisation ℓ_0

Première tentative de méthode pénalisée pour introduire de la parcimonie : utiliser ℓ_0 pour la pénalisation / régularisation

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda = \underset{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left(\underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_0}_{\text{régularisation}} \right)}$$

HÉLAS : problème combinatoire. La résolution exacte nécessite de considérer tous les sous modèles (*i.e.*, calculer les estimateurs pour tous les supports possibles) et il y en a 2^p, cela veut dire calculer 2^p estimateurs des moindres carrés !

Exemple:

$p = 10$ possible : $\approx 10^3$ moindre carrés

$p = 30$ impossible : $\approx 10^{10}$ moindre carrés

<u>Rem</u>: problème est "NP-dur"

Sommaire

Le Lasso : la définition pénalisée

Lasso : *Least Absolute Shrinkage and Selection Operator*
Tibshirani (1996)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Lasso}} = \underset{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left(\underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2}_{\textbf{attache aux données}} + \underbrace{\lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_1}_{\textbf{régularisation}} \right)$$

où $\|\boldsymbol{\theta}\|_1 = \sum_{j=1}^{p} |\theta_j|$ (somme des valeurs absolues des coefficients)

- On retrouve de nouveau les cas limites :

$$\lim_{\lambda\to 0} \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Lasso}} = \hat{\boldsymbol{\theta}}^{\mathrm{MCO}}$$

$$\lim_{\lambda\to +\infty} \hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Lasso}} = 0 \in \mathbb{R}^p$$

- **Attention** : l'estimateur Lasso n'est pas toujours **unique** pour un λ fixé (prendre par exemple deux colonnes identiques)

Interprétation contrainte

Un problème de la forme :

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\text{Lasso}} = \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \left(\underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_1}_{\text{régularisation}} \right)}$$

admet la même solution qu'une version contrainte :

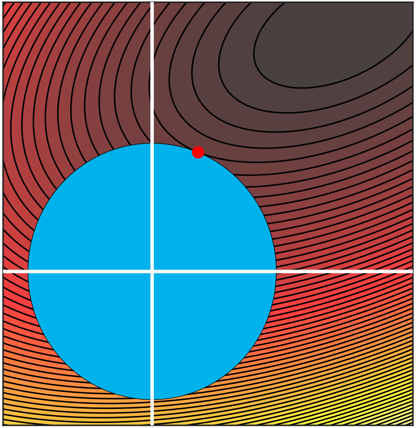
$$\begin{cases} \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\arg\min} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 \\ \text{t.q. } \|\boldsymbol{\theta}\|_1 \leqslant T \end{cases}$$

pour un certain $T > 0$.

<u>Rem</u>: hélas le lien $T \leftrightarrow \lambda$ n'est pas explicite

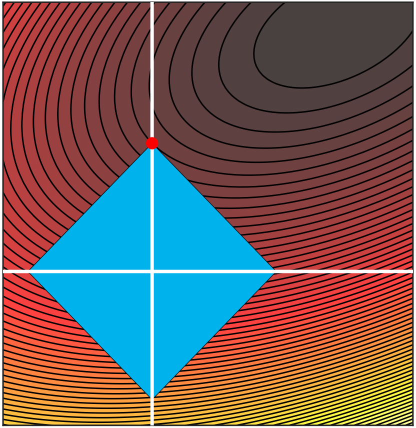
- Si $T \to 0$ on retrouve le vecteur nul : $0 \in \mathbb{R}^p$
- Si $T \to \infty$ on retrouve $\hat{\boldsymbol{\theta}}^{\text{MCO}}$ (non contraint)

Mise à zéro de certains coefficients



Optimisation sous contrainte ℓ_2 : solution non parcimonieuse

Mise à zéro de certains coefficients



Optimisation sous contrainte ℓ_1 : solution parcimonieuse

Le cas orthogonal : le seuillage doux

Retour sur un cas simple (*design* orthogonal) : $X^\top X = \mathrm{Id}_p$

$$\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 = \|X^\top \mathbf{y} - X^\top X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 = \|X^\top \mathbf{y} - \boldsymbol{\theta}\|_2^2$$

car X est une isométrie dans ce cas, l'objectif du lasso devient :

$$\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 + \lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_1 = \sum_{j=1}^{p}\left(\frac{1}{2}(X_j^\top \mathbf{y} - \theta_j)_2^2 + \lambda|\theta_j|\right)$$

Problème séparable : problème qui revient à minimiser terme à terme en séparant les termes la somme.

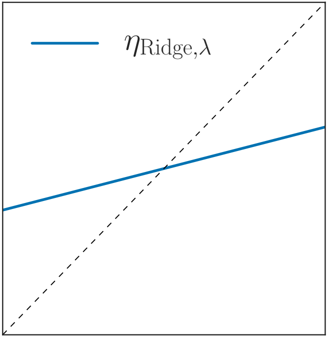
Il faut donc minimiser : $x \mapsto \frac{1}{2}(z - x)_2^2 + \lambda|x|$ pour $z = \mathbf{x}_j^\top \mathbf{y}$

Rem: on parle d'**opérateur proximal** en z de la fonction $x \mapsto \lambda|x|$ (*cf.* Parikh et Boyd (2013), pour les méthodes proximales)

Régularisation en 1D

Solution du problème : $\eta_\lambda(z) = \underset{x \in \mathbb{R}}{\arg\min}\, x \mapsto \frac{1}{2}(z-x)_2^2 + \lambda |x|^2/2$

$$\eta_\lambda(z) = \frac{z}{1+\lambda}$$

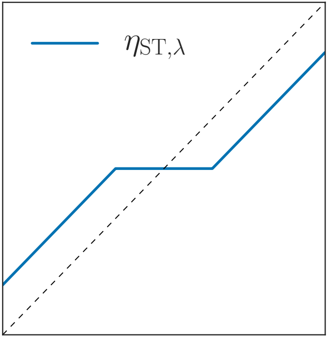


Contraction ℓ_2 : *Ridge*

Régularisation en 1D

Solution du problème : $\eta_\lambda(z) = \arg\min_{x \in \mathbb{R}} x \mapsto \dfrac{1}{2}(z-x)_2^2 + \lambda|x|$

$$\eta_\lambda(z) = \operatorname{sign}(z)(|z| - \lambda)_+$$

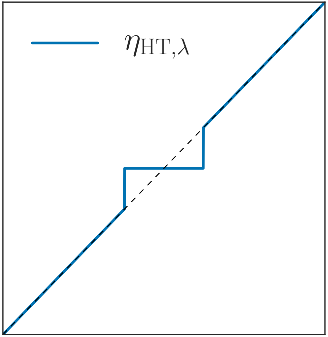


Contraction ℓ_1 : Seuillage doux (en : *soft thresholding*)

Régularisation en 1D

Solution du problème : $\eta_\lambda(z) = \underset{x \in \mathbb{R}}{\arg\min}\, x \mapsto \frac{1}{2}(z-x)_2^2 + \lambda \mathbb{1}_{x \neq 0}$

$$\eta_\lambda(z) = z \mathbb{1}_{|z| \geqslant \sqrt{2\lambda}}$$



Contraction ℓ_0 : Seuillage dur (en : *hard thresholding*)

Sommaire

Sous-gradients / sous-différentielles

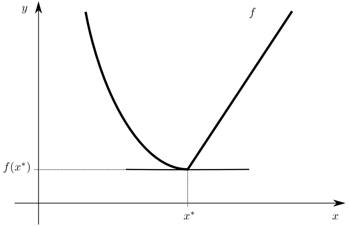
Définition : sous-gradient / sous-différentielle

Pour $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction convexe, $u \in \mathbb{R}^n$ est un **sous-gradient** de f en x^*, si pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ on a

$$f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle$$

La **sous-différentielle** est l'ensemble $\partial f(x^*) = \{u \in \mathbb{R}^n : \forall x \in \mathbb{R}^n, f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle\}$.

Rem: Si le sous-gradient est unique, on retrouve le gradient



Sous-gradients / sous-différentielles

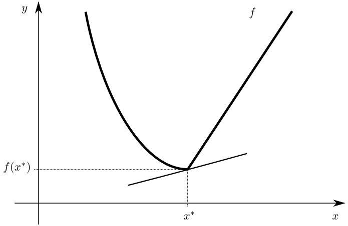
Définition : sous-gradient / sous-différentielle

Pour $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction convexe, $u \in \mathbb{R}^n$ est un **sous-gradient** de f en x^*, si pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ on a

$$f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle$$

La **sous-différentielle** est l'ensemble
$\partial f(x^*) = \{u \in \mathbb{R}^n : \forall x \in \mathbb{R}^n, f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle\}$.

Rem: Si le sous-gradient est unique, on retrouve le gradient



Sous-gradients / sous-différentielles

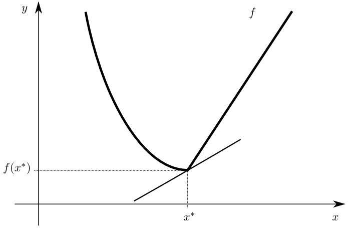
Définition : sous-gradient / sous-différentielle

Pour $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction convexe, $u \in \mathbb{R}^n$ est un **sous-gradient** de f en x^*, si pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ on a

$$f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle$$

La **sous-différentielle** est l'ensemble $\partial f(x^*) = \{u \in \mathbb{R}^n : \forall x \in \mathbb{R}^n, f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle\}$.

Rem: Si le sous-gradient est unique, on retrouve le gradient



Sous-gradients / sous-différentielles

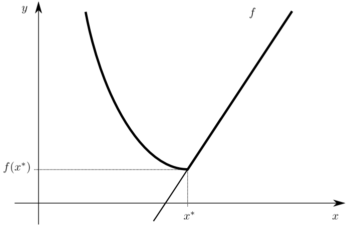
Définition : sous-gradient / sous-différentielle

Pour $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ une fonction convexe, $u \in \mathbb{R}^n$ est un **sous-gradient** de f en x^*, si pour tout $x \in \mathbb{R}^n$ on a

$$f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle$$

La **sous-différentielle** est l'ensemble $\partial f(x^*) = \{u \in \mathbb{R}^n : \forall x \in \mathbb{R}^n, f(x) \geqslant f(x^*) + \langle u, x - x^* \rangle\}$.

Rem: Si le sous-gradient est unique, on retrouve le gradient



Règle de Fermat

Théorème

Un point x^* est un minimum d'une fonction convexe $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ si et seulement si $0 \in \partial f(x^*)$

Preuve : utiliser la définition des sous-gradients :

- 0 est un sous-gradient de f en x^* si et seulement si $\forall x \in \mathbb{R}^n, f(x) \geqslant f(x^*) + \langle 0, x - x^* \rangle$

Règle de Fermat

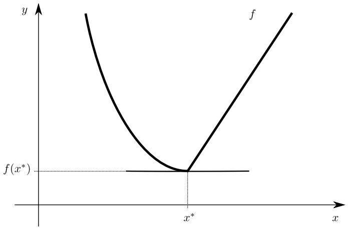
Théorème

Un point x^* est un minimum d'une fonction convexe $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ si et seulement si $0 \in \partial f(x^*)$

Preuve : utiliser la définition des sous-gradients :

- 0 est un sous-gradient de f en x^* si et seulement si $\forall x \in \mathbb{R}^n, f(x) \geqslant f(x^*) + \langle 0, x - x^* \rangle$

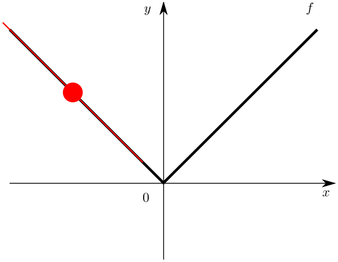
Rem: Visuellement cela correspond à une tangente horizontale



Sous-différentielle de la valeur absolue

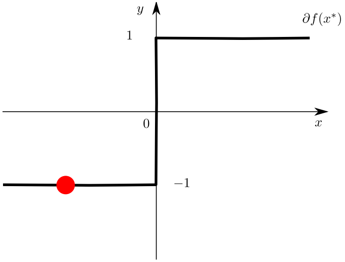
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$



Sous-différentielle (sign)

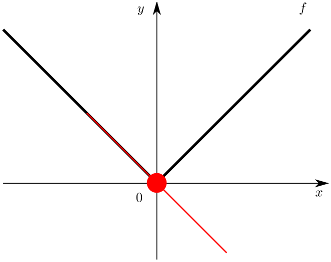
$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$



Sous-différentielle de la valeur absolue

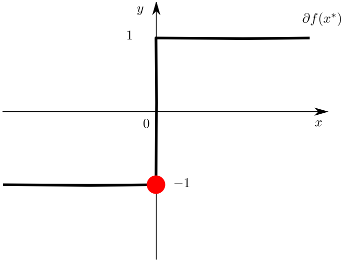
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \to \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$



Sous-différentielle (sign)

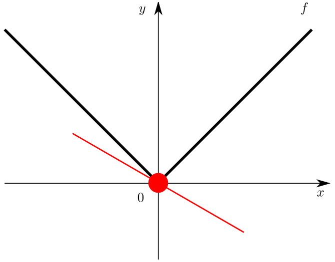
$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$



Sous-différentielle de la valeur absolue

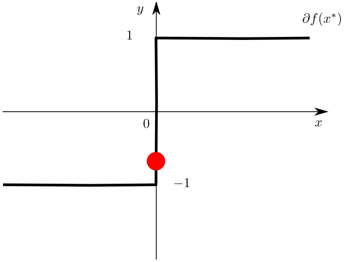
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \to \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$



Sous-différentielle (sign)

$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$



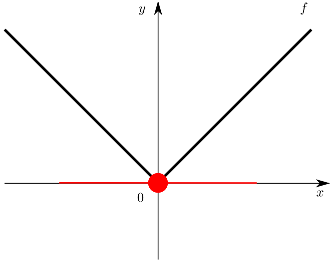
Sous-différentielle de la valeur absolue

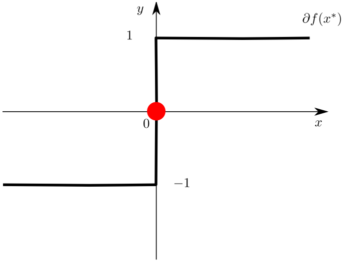
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \to \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$

Sous-différentielle (sign)

$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$

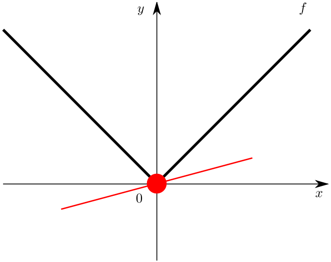




Sous-différentielle de la valeur absolue

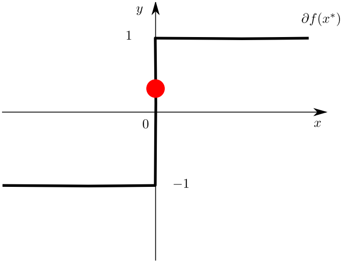
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \to \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$



Sous-différentielle (sign)

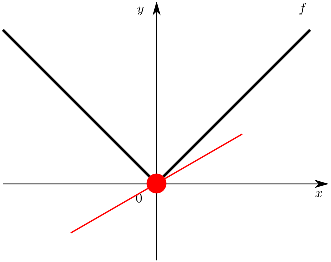
$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$



Sous-différentielle de la valeur absolue

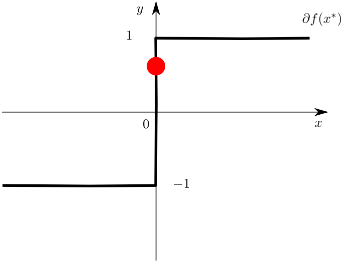
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$



Sous-différentielle (sign)

$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$



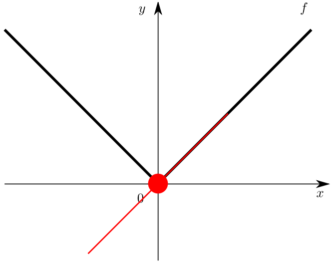
Sous-différentielle de la valeur absolue

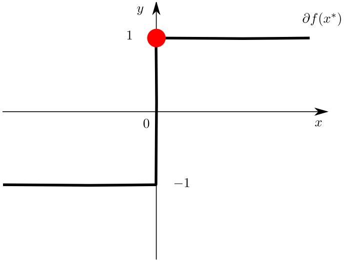
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$

Sous-différentielle (sign)

$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$

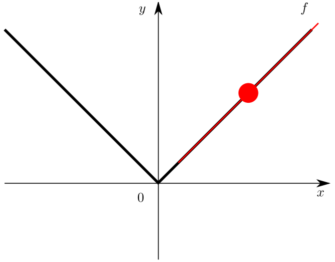




Sous-différentielle de la valeur absolue

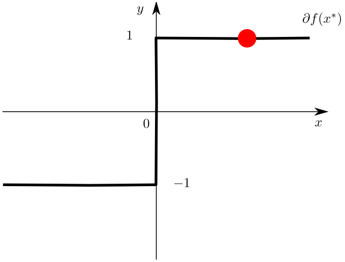
Fonction (abs) :

$$f : \begin{cases} \mathbb{R} & \rightarrow \mathbb{R} \\ x & \mapsto |x| \end{cases}$$



Sous-différentielle (sign)

$$\partial f(x^*) = \begin{cases} \{-1\} & \text{if } x^* \in]-\infty, 0[\\ \{1\} & \text{if } x^* \in]0, \infty[\\ [-1, 1] & \text{if } x^* = 0 \end{cases}$$



Seuillage doux : forme explicite

$$\eta_{\text{Lasso},\lambda}(z) = \begin{cases} 0 & \textsf{si } |z| \leqslant \lambda \\ z - \lambda & \textsf{si } \ z \ \geqslant \lambda \\ z + \lambda & \textsf{si } \ z \ \leqslant -\lambda \end{cases}$$

Exo: Prouver le résultat précédent en utilisant les sous-gradients

---

Condition de Fermat pour le Lasso

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso}} = \underset{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p}{\arg\min} \left(\underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_1}_{\text{régularisation}} \right)}$$

Conditions nécessaires et suffisantes d'optimalité (Fermat) :

$$\boxed{\forall j \in [p],\ \mathbf{x}_j^\top \left(\frac{y - X\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso}}}{\lambda} \right) \in \begin{cases} \{\operatorname{sign}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso}})_j\} & \text{si} \quad (\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso}})_j \neq 0, \\ [-1, 1] & \text{si} \quad (\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso}})_j = 0. \end{cases}}$$

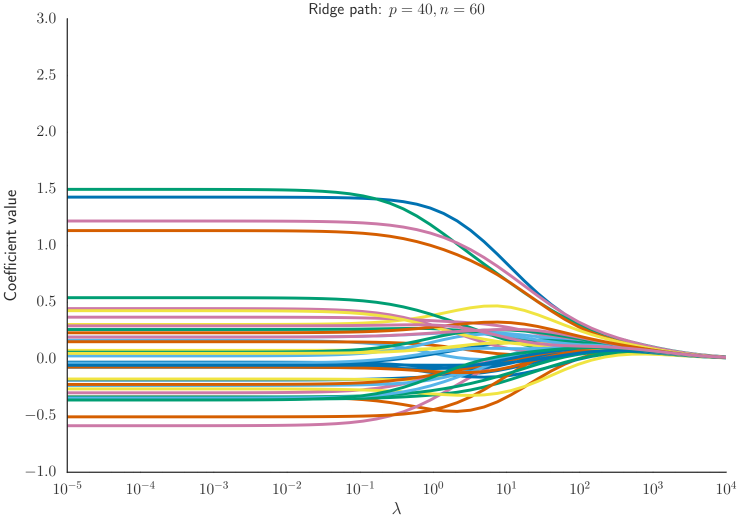
<u>Rem</u>: Si $\lambda > \lambda_{\max} := \max_{j\in[\![1,p]\!]} |\langle \mathbf{x}_j, \mathbf{y} \rangle|$ alors $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso}} = 0$

Exemple numérique : simulation

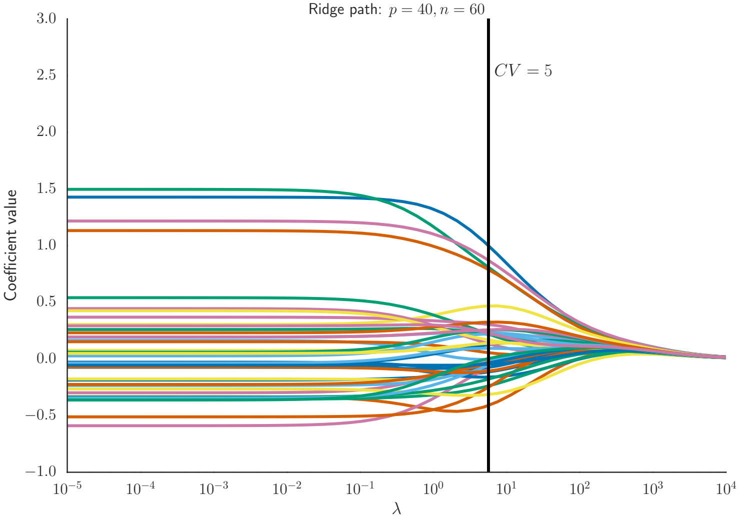
- $\boldsymbol{\theta}^* = (1, 1, 1, 1, 1, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^p$ (5 coefficients non-nuls)
- $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ a des colonnes tirées selon une loi gaussienne
- $y = X\boldsymbol{\theta}^* + \varepsilon \in \mathbb{R}^n$ avec $\varepsilon \sim \mathcal{N}(0, \sigma^2 \, \mathrm{Id}_n)$
- On utilise une grille de 50 valeurs de λ

Pour cet exemple les tailles sont : $n = 60, p = 40, \sigma = 1$

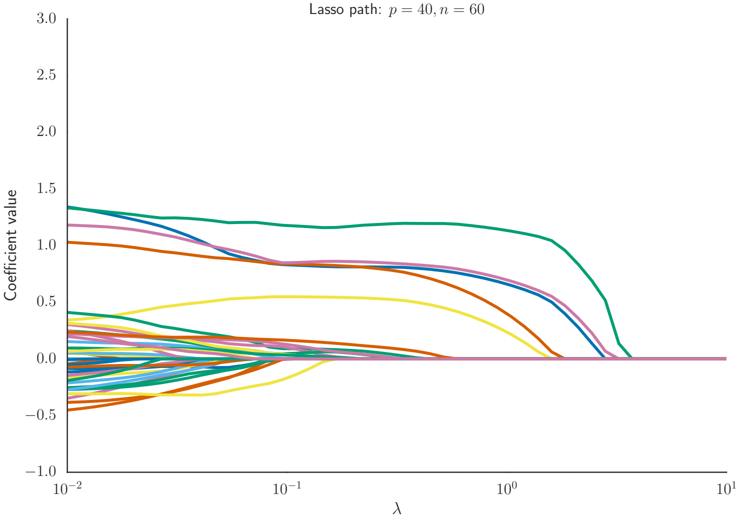
Lasso vs *Ridge*



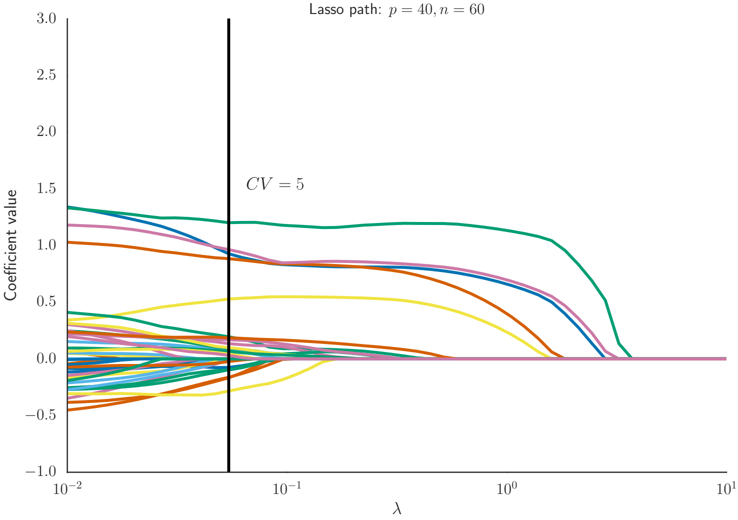
Lasso vs *Ridge*



Lasso vs *Ridge*



Lasso vs *Ridge*



Intérêt du Lasso

- Enjeu numérique : le Lasso est un problème **convexe**
- Sélection de variables / solutions parcimonieuses (en : *sparse*) : $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso}}$ à potentiellement de nombreux coefficients nuls. Le paramètre λ contrôle le niveau de parcimonie : si λ est grand, les solution sont très creuses.
  Exemple: On obtient 24 coefficients non nuls pour `LassoCV` dans la simulation précédente
  Rem: `RidgeCV` n'a aucun coefficient nul

Analyse de l'estimateur dans le cas général

L'analyse est nettement plus poussée que pour les moindres carrées ou que pour *Ridge* et peut-être trouvé dans des références récentes (*cf.* Buhlmann et van de Geer (2011) pour des résultats théoriques)

En résumé : on biaise l'estimateur des moindres carrés pour réduire la variance

Sommaire

Le biais du Lasso

Le lasso est biaisé : il contracte les grands coefficients vers 0

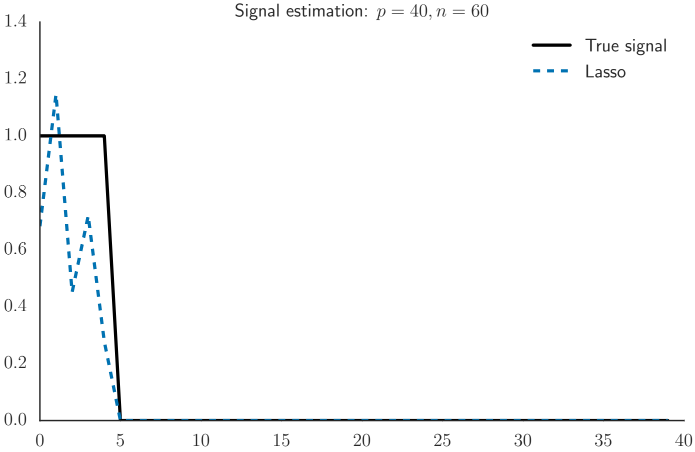


Illustration sur l'exemple

Le biais du Lasso

Le lasso est biaisé : il contracte les grands coefficients vers 0

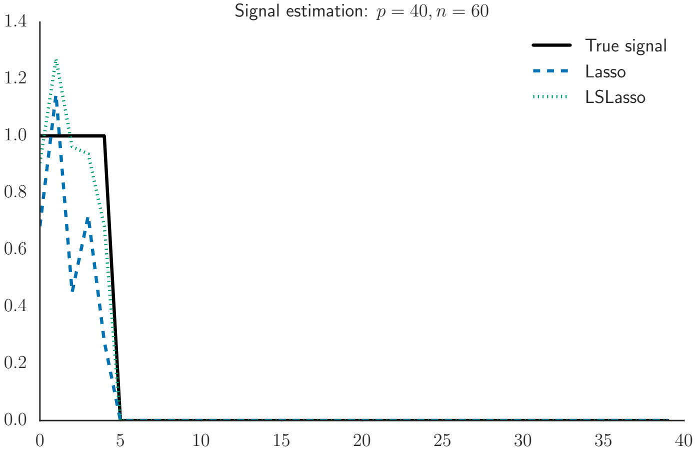


Illustration sur l'exemple

Le biais du Lasso : un remède simple

Comme les grands coefficients sont parfois contractés vers zéro, il est possible d'utiliser une procédure en deux étapes

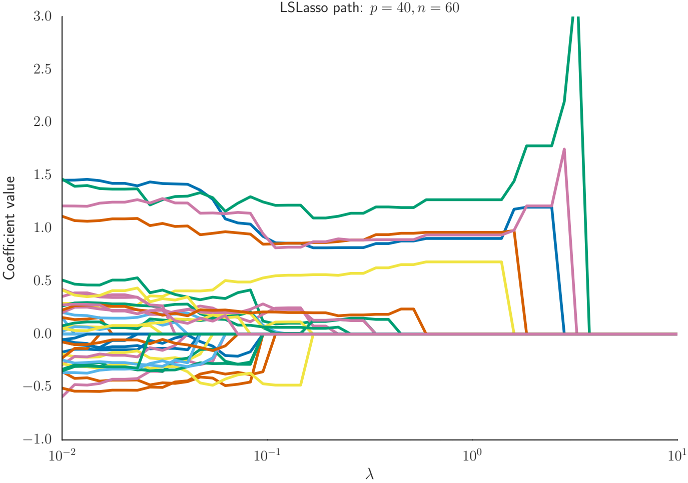
LSLasso (Least Square Lasso)

1. Lasso : obtenir $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso}}$
2. Moindres-carrés sur les variables actives $\mathrm{supp}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso}})$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{LSLasso}} = \underset{\substack{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p \\ \mathrm{supp}(\boldsymbol{\theta})=\mathrm{supp}(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso}})}}{\arg\min} \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2$$

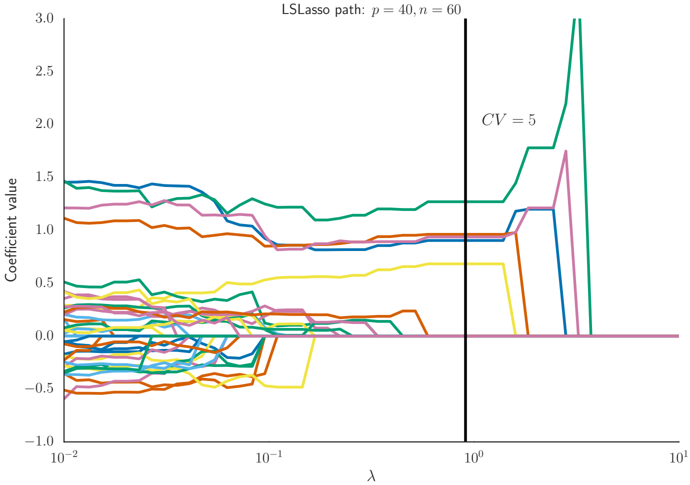
<u>Rem</u>: il faut faire la CV sur la procédure entière ; choisir le λ du Lasso par CV puis faire un moindre carré conserve trop de variables
<u>Rem</u>: LSLasso pas forcément codé dans les packages usuels

Débiasage



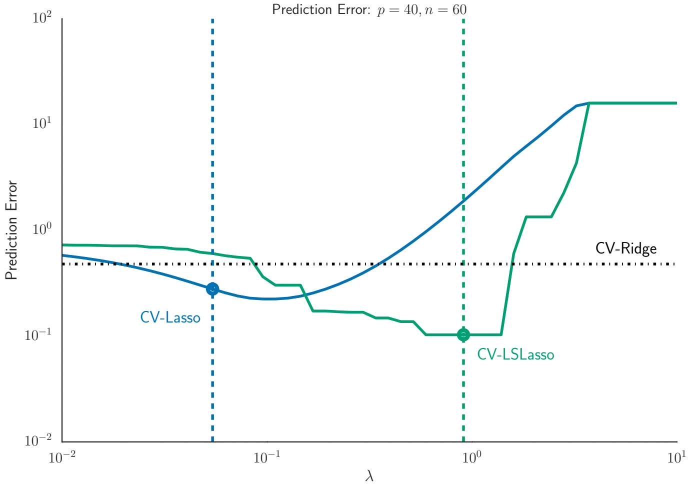
LSLasso path: $p = 40, n = 60$
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
Coefficient value
10^{-2}
10^{-1}
10^{0}
10^{1}
λ

Débiasage



LSLasso path: $p = 40, n = 60$
$CV = 5$
Coefficient value
λ
3.0
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
10^{-2}
10^{-1}
10^{0}
10^{1}

Prédiction : Lasso vs. LSLasso



Bilan du LSLasso

Avantages

- les “vrais” grands coefficients sont moins atténués
- en faisant la CV on récupère moins de variables parasites (amélioration de l'interprétabilité)
  e.g., sur l'exemple précédent le LSLassoCV retrouve exactement les 5 “vraies” variables non nulles

LSLasso : utile pour <u>l'estimation</u>

Limites

- la différence en prédiction n'est pas toujours flagrante
- Nécessite plus de calcul : re-calcule autant de moindre carrés que de paramètres λ, certes de dimension la taille des supports (on néglige les autres variables)

Adaptive-Lasso

Plusieurs noms pour une même idée :

- Adaptive-Lasso Zou (2006)
- ℓ_1 re-pondérés Candès, Waking et Boyd (2008)

L'idée sous-jacente est d'utiliser une pénalité non-convexe qui approche mieux $\|\cdot\|_0$, mais que l'on peut approcher facilement.
Exemple: prendre $\theta \mapsto \sum_{j=1}^{p} \sqrt{\theta_j}$
On procède par Lasso successifs, en faisant évoluer les poids :

Adaptive-Lasso

Plusieurs noms pour une même idée :

- Adaptive-Lasso Zou (2006)
- ℓ_1 re-pondérés Candès, Waking et Boyd (2008)

L'idée sous-jacente est d'utiliser une pénalité non-convexe qui approche mieux $\|\cdot\|_0$, mais que l'on peut approcher facilement.
Exemple: prendre $\theta \mapsto \sum_{j=1}^{p} \sqrt{\theta_j}$
On procède par Lasso successifs, en faisant évoluer les poids :

1. Initialiser : $\hat{w} \leftarrow (1, \ldots, 1)^\top$

Adaptive-Lasso

Plusieurs noms pour une même idée :

- Adaptive-Lasso Zou (2006)
- ℓ_1 re-pondérés Candès, Waking et Boyd (2008)

L'idée sous-jacente est d'utiliser une pénalité non-convexe qui approche mieux $\|\cdot\|_0$, mais que l'on peut approcher facilement.
Exemple: prendre $\theta \mapsto \sum_{j=1}^{p} \sqrt{\theta_j}$
On procède par Lasso successifs, en faisant évoluer les poids :

1. Initialiser : $\hat{w} \leftarrow (1, \ldots, 1)^\top$
2. Résoudre : $\hat{\theta} \leftarrow \arg\min_{\theta} \left(\|\mathbf{y} - X\theta\|_2^2/2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \hat{w}_j |\theta_j| \right)$

Adaptive-Lasso

Plusieurs noms pour une même idée :

- Adaptive-Lasso Zou (2006)
- ℓ_1 re-pondérés Candès, Waking et Boyd (2008)

L'idée sous-jacente est d'utiliser une pénalité non-convexe qui approche mieux $\|\cdot\|_0$, mais que l'on peut approcher facilement.
Exemple: prendre $\theta \mapsto \sum_{j=1}^{p} \sqrt{\theta_j}$
On procède par Lasso successifs, en faisant évoluer les poids :

1. Initialiser : $\hat{w} \leftarrow (1, \ldots, 1)^\top$
2. Résoudre : $\hat{\theta} \leftarrow \arg\min_{\theta} \left(\|\mathbf{y} - X\theta\|_2^2/2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \hat{w}_j |\theta_j| \right)$
3. Mettre à jour les poids : $\hat{w}_j \leftarrow 1/|\hat{\theta}_j|^{0.5}$, $\forall j \in [\![1, p]\!]$

Adaptive-Lasso

Plusieurs noms pour une même idée :

- Adaptive-Lasso Zou (2006)
- ℓ_1 re-pondérés Candès, Waking et Boyd (2008)

L'idée sous-jacente est d'utiliser une pénalité non-convexe qui approche mieux $\|\cdot\|_0$, mais que l'on peut approcher facilement.
Exemple: prendre $\theta \mapsto \sum_{j=1}^{p} \sqrt{\theta_j}$
On procède par Lasso successifs, en faisant évoluer les poids :

1. Initialiser : $\hat{w} \leftarrow (1, \dots, 1)^\top$
2. Résoudre : $\hat{\theta} \leftarrow \arg\min_{\theta} \left(\|\mathbf{y} - X\theta\|_2^2/2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \hat{w}_j |\theta_j| \right)$
3. Mettre à jour les poids : $\hat{w}_j \leftarrow 1/|\hat{\theta}_j|^{0.5}$, $\forall j \in [\![1, p]\!]$
4. Itérer (souvent 2 ou 3 itérations suffisent)

Adaptive-Lasso

Plusieurs noms pour une même idée :

- Adaptive-Lasso Zou (2006)
- ℓ_1 re-pondérés Candès, Waking et Boyd (2008)

L'idée sous-jacente est d'utiliser une pénalité non-convexe qui approche mieux $\|\cdot\|_0$, mais que l'on peut approcher facilement.
Exemple: prendre $\theta \mapsto \sum_{j=1}^{p} \sqrt{\theta_j}$
On procède par Lasso successifs, en faisant évoluer les poids :

1. Initialiser : $\hat{w} \leftarrow (1, \ldots, 1)^\top$
2. Résoudre : $\hat{\theta} \leftarrow \arg\min_{\theta} \left(\|\mathbf{y} - X\theta\|_2^2/2 + \lambda \sum_{j=1}^{p} \hat{w}_j |\theta_j| \right)$
3. Mettre à jour les poids : $\hat{w}_j \leftarrow 1/|\hat{\theta}_j|^{0.5}$, $\forall j \in [\![1, p]\!]$
4. Itérer (souvent 2 ou 3 itérations suffisent)

Rem: numériquement on utilise un solveur de Lasso, avec des mises à l'échelle adaptées (*cf.* code source associé)

Sommaire

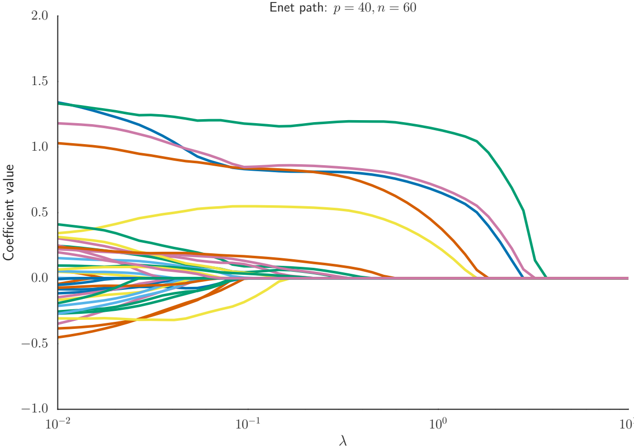
Elastic-net : régularisation ℓ_1/ℓ_2

L'Elastic-Net introduit par Zou et Hastie (2005) est solution de

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p} \left(\frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 + \lambda \left(\alpha \|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha) \|\boldsymbol{\theta}\|_2^2 / 2 \right) \right)$$

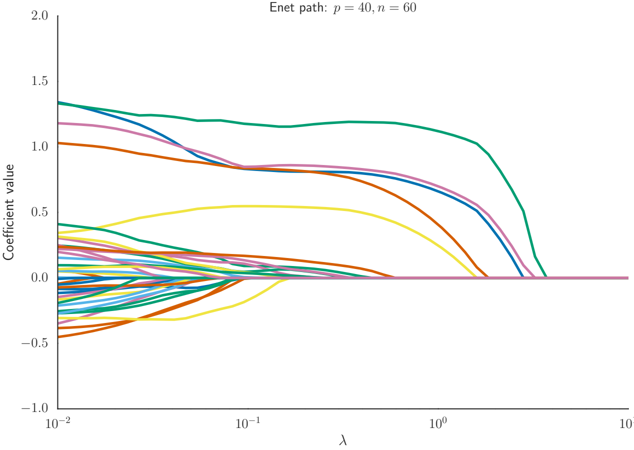
<u>Rem</u>: Deux paramètres : un pour la régularisation globale, un qui balance la régularisation Ridge vs. Lasso.
<u>Rem</u>: La solution est unique et le support de l'Elastic-Net est de taille plus petite que $\min(n, p)$.

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



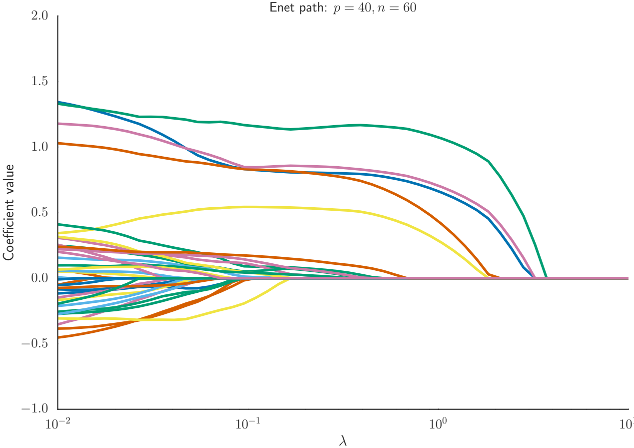
$$\alpha = 1.00$$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



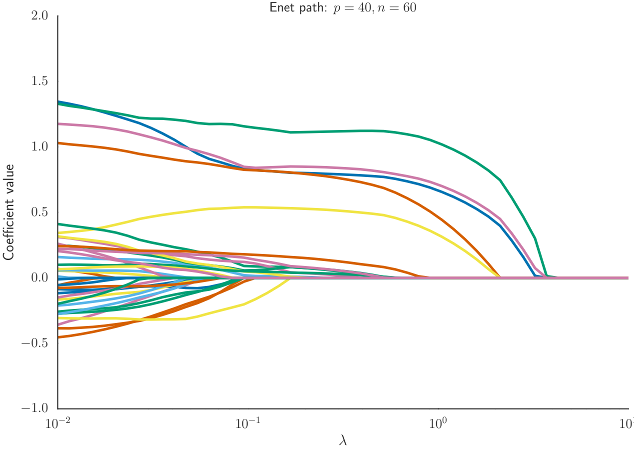
$$\alpha = 0.99$$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



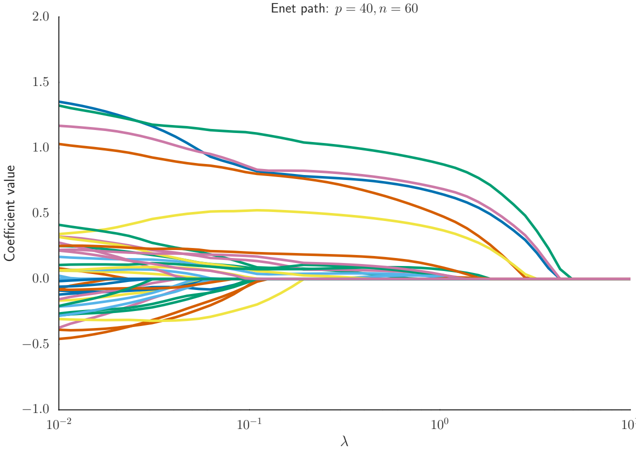
$$\alpha = 0.95$$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



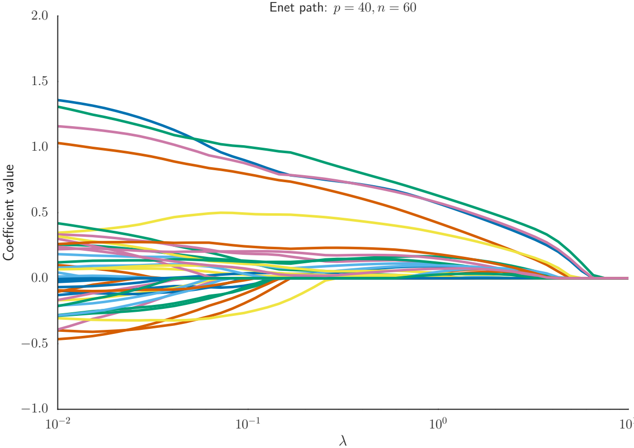
$\alpha = 0.90$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



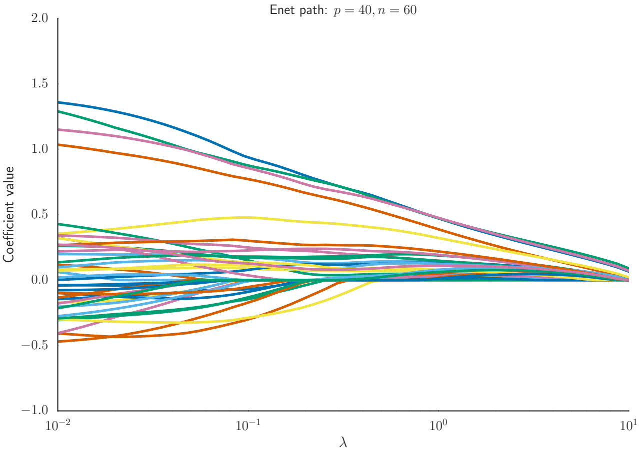
$$\alpha = 0.75$$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



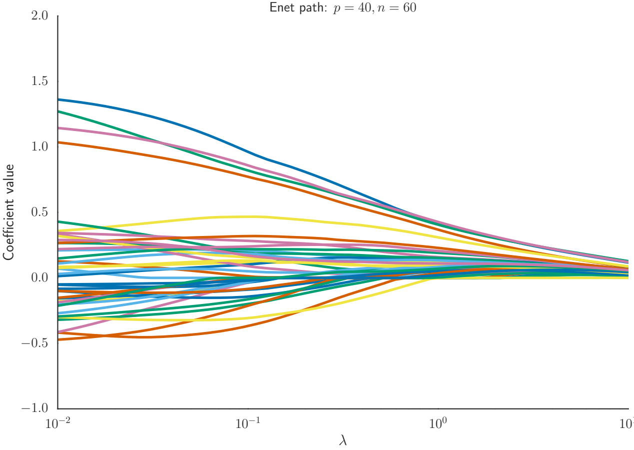
$\alpha = 0.50$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



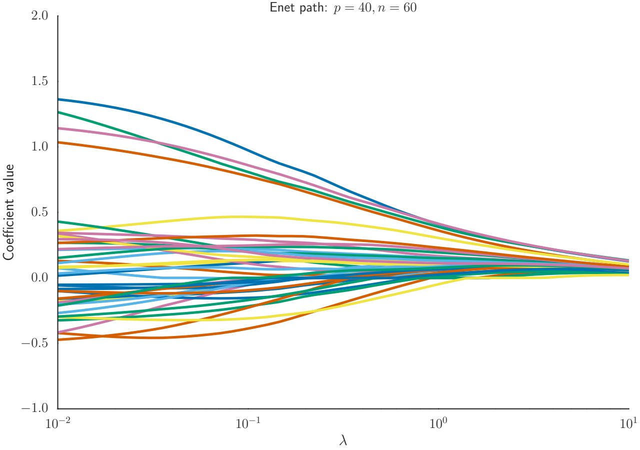
$\alpha = 0.25$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



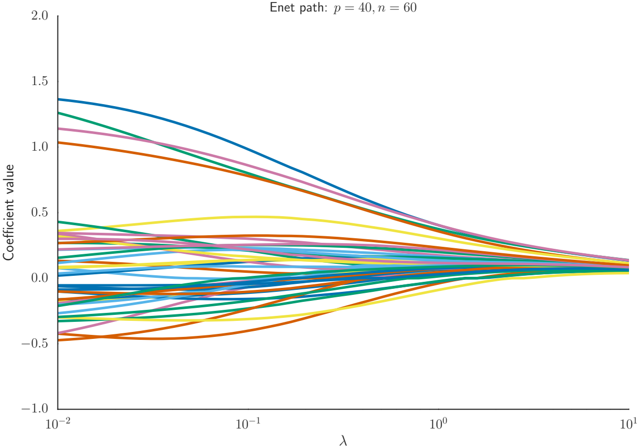
$\alpha = 0.1$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



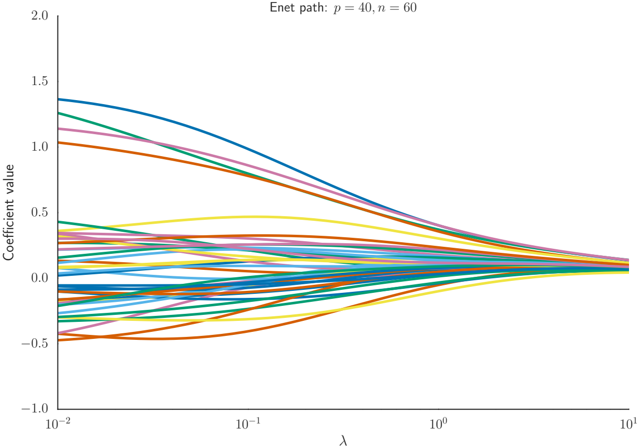
$$\alpha = 0.05$$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



$\alpha = 0.01$

Elastic-Net : $\alpha\|\boldsymbol{\theta}\|_1 + (1-\alpha)\|\boldsymbol{\theta}\|_2^2/2$



$$\alpha = 0.00$$

Structure du support

On suppose ici que l'on connaît une structure de groupes sur les variables au préalable de l'étude : $[\![1, p]\!] = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g$

Vecteur et ses coordonnées actives (en orange) :

Support creux : quelconque

Pénalité envisagée : Lasso

$\|\theta\|_1 = \sum_{j=1}^{p} |\theta_j|$

Structure du support

On suppose ici que l'on connaît une structure de groupes sur les variables au préalable de l'étude : $[\![1, p]\!] = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g$

Vecteur et ses coordonnées actives (en orange) :

Support creux : groupes

Pénalité envisagée : Groupe-Lasso

$\|\theta\|_{2,1} = \sum_{g \in G} \|\theta_j\|_2$

Structure du support

On suppose ici que l'on connaît une structure de groupes sur les variables au préalable de l'étude : $[\![1, p]\!] = \bigcup_{g \in \mathcal{G}} g$

Vecteur et ses coordonnées actives (en orange) :

Support creux : groupes + sous groupes

Pénalité envisagée : Sparse-Groupe-Lasso

$$\alpha \|\theta\|_1 + (1-\alpha)\|\theta\|_{2,1} = \ \alpha \sum_{j=1}^{p} |\theta_j| + (1-\alpha) \sum_{g \in G} \|\theta_g\|_2$$

Groupe-Lasso

La pénalisation par la norme ℓ_1 assure que peu de coefficients sont actifs, mais aucune structure sur le support n'est utilisée.
On peut chercher à avoir :

- Parcimonie par groupes/blocs : Groupe-Lasso Yuan et Lin (2006)
- Parcimonie individuelle et par groupe : Sparse Groupe-Lasso Simon, Friedman, Hastie et Tibshirani (2012)
- Structure hiérarchiques (par exemple avec les interactions d'ordre supérieur) Bien,Taylor et Tibshirani (2013)
- Structure sur des graphes, etc.

Sommaire

Stabilisation du Lasso

Le lasso peut être **instable** : quand il n'y a pas unicité de la solution (*e.g.*, quand $p > n$) selon le solveur numérique et la précision demandée, il peut y avoir des erreurs sur les variables sélectionnées.
On peur limiter ce genre de défauts en utilisant des techniques de ré-échantillonnage :

- Bolasso Bach (2008)
- Stability Selection Meinshausen et Buhlmann (2010)

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Bolasso}}$

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Bolasso}}$

for $k = 1, \ldots, m$ **do**

end

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Bolasso}}$

for $k = 1, \ldots, m$ **do**

  Générer un échantillon *bootstrap* : $X^{(k)}, y^{(k)}$

end

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Bolasso}}$

for $k = 1, \ldots, m$ **do**

Générer un échantillon *bootstrap* : $X^{(k)}, y^{(k)}$

Calculer le Lasso sur cet échantillon : $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso},(k)}$

end

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Bolasso}}$

for $k = 1, \ldots, m$ **do**

  Générer un échantillon *bootstrap* : $X^{(k)}, y^{(k)}$

  Calculer le Lasso sur cet échantillon : $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso},(k)}$

  Calculer le support associé : $S_k = \operatorname{supp}\left(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso},(k)}\right)$

end

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Bolasso}}$

for $k = 1, \ldots, m$ **do**

  Générer un échantillon *bootstrap* : $X^{(k)}, y^{(k)}$

  Calculer le Lasso sur cet échantillon : $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso},(k)}$

  Calculer le support associé : $S_k = \mathrm{supp}\left(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\mathrm{Lasso},(k)}\right)$

end

Calculer : $S := \bigcap_{k=1}^{m} S_k$

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Bolasso Bach (2008)

Data: $X, \mathbf{y}$, nb de réplications m, régularisation λ

Result: un support S, et un vecteur $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Bolasso}}$

for $k = 1, \ldots, m$ **do**

Générer un échantillon *bootstrap* : $X^{(k)}, y^{(k)}$

Calculer le Lasso sur cet échantillon : $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso},(k)}$

Calculer le support associé : $S_k = \operatorname{supp}\left(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Lasso},(k)}\right)$

end

Calculer : $S := \displaystyle\bigcap_{k=1}^{m} S_k$

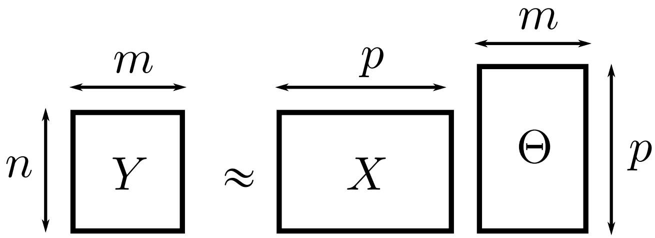
Calculer : $\hat{\boldsymbol{\theta}}_\lambda^{\text{Bolasso}} \in \underset{\substack{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p \\ \operatorname{supp}(\boldsymbol{\theta}) = S}}{\arg\min} \dfrac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2$

Exo: coder le Bolasso avec `Python` et `sklearn`

Sommaire

Régression multi-tâches

On veut résoudre m régressions linéaires conjointement : $Y \approx X\Theta$



avec

- $Y \in \mathbb{R}^{n \times m}$: matrice des observations
- $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$: matrice de design (commune)
- $\Theta \in \mathbb{R}^{p \times m}$: matrice des coefficients

Exemple: plusieurs signaux sont observées au cours du temps (*e.g.*, divers capteurs d'un même phénomène)

Rem: *cf.* `MultiTaskLasso` dans `sklearn` pour le numérique.

Moindre carres pénalisées

Dans le contexte de la régression multi-tâches on peut résoudre les moindres carres pénalisés :

$$\boxed{\hat{\Theta}_\lambda = \underset{\Theta \in \mathbb{R}^{p \times m}}{\arg\min} \left(\underbrace{\frac{1}{2} \| Y - X\Theta \|_F^2}_{\text{attache aux données}} + \underbrace{\lambda \Omega(\Theta)}_{\text{régularisation}} \right)}$$

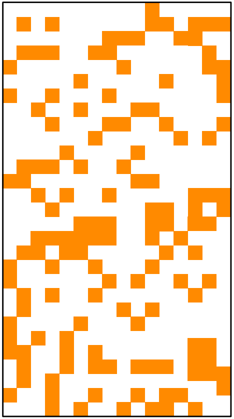
où Ω est une pénalité / régularisation à préciser.

<u>Rem</u>: la norme de Frobenius $\| \cdot \|_F$ est définie comme suit ; pour toute matrice $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$:

$$\|A\|_F^2 = \sum_{j_1=1}^{n_1} \sum_{j_2=1}^{n_2} A_{j_1,j_2}^2$$

Pénalisation pour le cas multi-tâches

On doit adapter les pénalisations vectorielles rencontrées :



Paramètre Θ

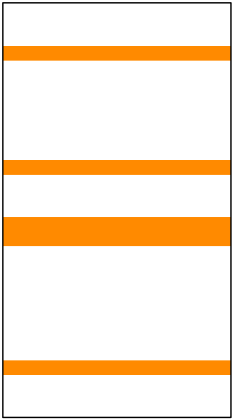
Support creux :
quelconque

Pénalité Lasso :

$$\|\Theta\|_1 = \sum_{j=1}^{p} \sum_{k=1}^{m} |\Theta_{j,k}|$$

Pénalisation pour le cas multi-tâches

On doit adapter les pénalisations vectorielles rencontrées :



Paramètre Θ

Support creux :
groupes

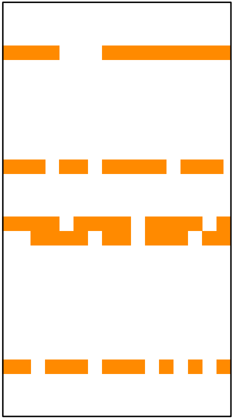
Pénalité Groupe-Lasso :

$$\|\Theta\|_{2,1} = \sum_{j=1}^{p} \|\Theta_{j:}\|_2$$

Rem: on note $\Theta_{j,:}$ la j^{e} ligne de Θ

Pénalisation pour le cas multi-tâches

On doit adapter les pénalisations vectorielles rencontrées :



Paramètre Θ

Support creux :
groupes + sous groupes

Pénalité Sparse-Groupe-Lasso :

$$\alpha\|\Theta\|_1 \; + \; (1 \; - \; \alpha)\|\Theta\|_{2,1}$$

Modèles Linéaires Généralisés (en : GLM)

- La régression logistique pour la classification (*cf.* cours de Florence D'Alché)
- La régression de Poisson pour des modèles discrets
- Complétion de matrice (*cf.* INF 341)

Sommaire

Descente par coordonnées

$$\underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\arg\min}\, f(\boldsymbol{\theta})$$

Initialisation : $\boldsymbol{\theta}^{(0)}$

$$\begin{aligned}
\theta_1^{(k)} &\in \underset{\theta_1 \in \mathbb{R}}{\arg\min}\, f(\theta_1, \theta_2^{(k-1)}, \theta_3^{(k-1)} \ldots, \theta_p^{(k-1)}) \\
\theta_2^{(k)} &\in \underset{\theta_2 \in \mathbb{R}}{\arg\min}\, f(\theta_1^{(k)}, \theta_2, \theta_3^{(k-1)}, \ldots, \theta_p^{(k-1)}) \\
\theta_3^{(k)} &\in \underset{\theta_3 \in \mathbb{R}}{\arg\min}\, f(\theta^{(k)}, \theta_2^{(k)}, \theta_3, \ldots, \theta_p^{(k-1)}) \\
&\vdots \\
\theta_p^{(k)} &\in \underset{\theta_p \in \mathbb{R}}{\arg\min}\, f(\theta_1^{(k)}, \theta_2^{(k)}, \theta_3^{(k)}, \ldots, \theta_p)
\end{aligned}$$

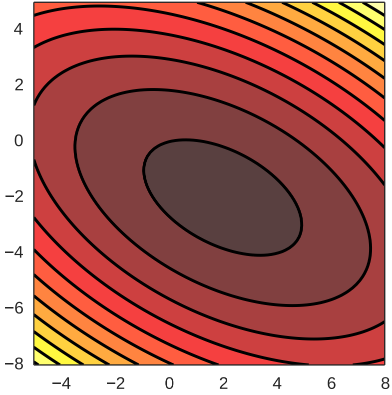
et on cycle sur les coordonnés

Intérêt

- La descente par coordonnée peut être très rapide (beaucoup d'opérations élémentaires)
- Mathématiquement on peut montrer que cet algorithme converge vers un minimum (sous certaines conditions : fonction lisse, ou bien non lisse mais séparable *cf.* Tseng (2001))
- l'ordre de parcours peut être arbitraire, aléatoire, etc.
- on peut faire le même raisonnement par bloc : on ne met pas à jour une seule coordonnées, mais tout un ensemble.

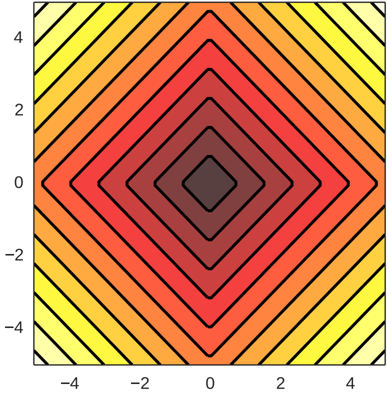
Motivation (cas convexe)

- Convergence vers un minimum pour des fonctions lisses
  cf. Tseng (2001)



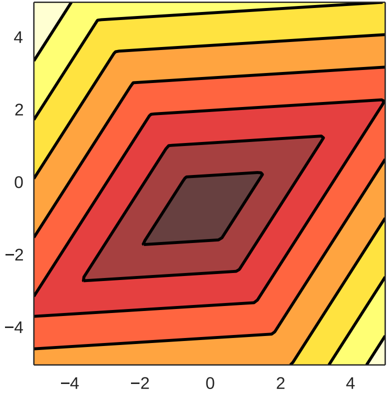
Motivation (cas convexe)

- Convergence vers un minimum pour des fonctions non-lisses séparables *cf.* Tseng (2001)



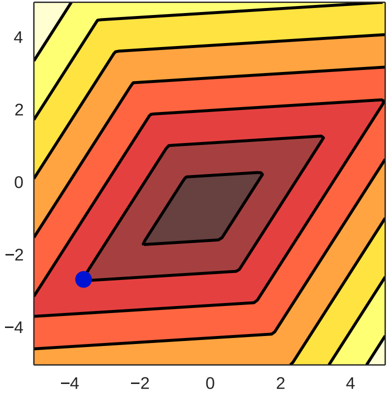
Motivation (cas convexe)

- Pas de convergence vers un minimum pour des fonctions non-séparable/non-lisses : les itérés restent coincés



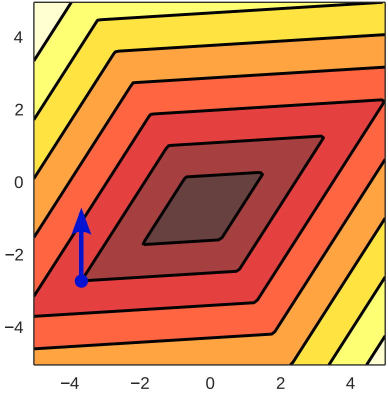
Motivation (cas convexe)

- Pas de convergence vers un minimum pour des fonctions non-séparable/non-lisses : les itérés restent coincés



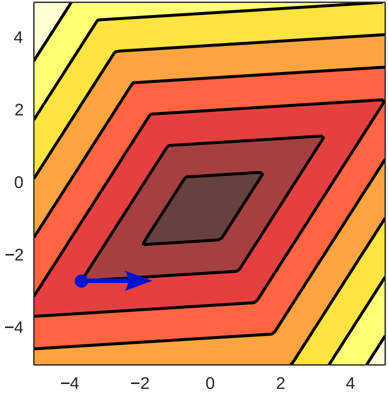
Motivation (cas convexe)

- Pas de convergence vers un minimum pour des fonctions non-séparable/non-lisses : les itérés restent coincés



Motivation (cas convexe)

- Pas de convergence vers un minimum pour des fonctions non-séparable/non-lisses : les itérés restent coincés



Moindre carrés

$$\arg\min_{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p} f(\boldsymbol{\theta}) \text{ pour } f(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \sum_{j=1}^{p}\theta_j X_{i,j})^2$$

Rappel : $\nabla f(\boldsymbol{\theta}) = X^\top(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^\top(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) \\ \vdots \\ \mathbf{x}_p^\top(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \theta_1}(\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_p}(\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix}$

Minimise en θ_j avec les autres θ_k $(k \neq j)$ fixes

$$0 = \frac{\partial f}{\partial \theta_j}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{x}_j^\top(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) = \mathbf{x}_j^\top\left(\mathbf{x}_j\theta_j + \sum_{k\neq j}\mathbf{x}_k\theta_k - \mathbf{y}\right)$$

$$\Leftrightarrow \theta_j = \frac{\mathbf{x}_j^\top\left(\mathbf{y} - \sum_{k\neq j}\mathbf{x}_k\theta_k\right)}{\mathbf{x}_j^\top\mathbf{x}_j} = \frac{\mathbf{x}_j^\top\left(\mathbf{y} - \sum_{k=1}^{p}\mathbf{x}_k\theta_k + \mathbf{x}_j\theta_j\right)}{\|\mathbf{x}_j\|_2^2}$$

CD pour les moindres carrés

Mise à jour intelligente en conservant dans une variable les résidus courant $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$
choisir une coordonnées j et faire

$$\begin{aligned} r^{\text{int}} &\leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \theta_j^{(k+1)} &\leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}} / \|\mathbf{x}_j\|_2^2 \\ r^{(k+1)} &= r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)} \end{aligned}$$

Impact mémoire faible :

- stocker un vecteur de résidu de taille n
- stocker un vecteur θ de taille p

Rem: Intérêt de normaliser à $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$

Ridge : descente par coordonnées

$$\arg\min_{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p} f(\boldsymbol{\theta}) \text{ pour } f(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n}(y_i - \sum_{j=1}^{p}\theta_j X_{i,j})^2 + \frac{\lambda}{2}\sum_{j=1}^{p}\theta_j^2$$

$$\nabla f(\boldsymbol{\theta}) = X^\top(X\boldsymbol{\theta}-\mathbf{y})+\lambda\boldsymbol{\theta} = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_1^\top(X\boldsymbol{\theta}-\mathbf{y})+\lambda\theta_1 \\ \vdots \\ \mathbf{x}_p^\top(X\boldsymbol{\theta}-\mathbf{y})+\lambda\theta_p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial\theta_1}(\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial\theta_p}(\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix}$$

Minimise en θ_j avec les autres θ_k $(k \neq j)$ fixes

$$0 = \frac{\partial f}{\partial\theta_j}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{x}_j^\top(X\boldsymbol{\theta}-\mathbf{y})+\lambda\theta_j = \mathbf{x}_j^\top\left(\mathbf{x}_j\theta_j + \sum_{k\neq j}\mathbf{x}_k\theta_k - \mathbf{y}\right)+\lambda\theta_j$$

$$\Leftrightarrow \theta_j = \frac{\mathbf{x}_j^\top\left(\mathbf{y}-\sum_{k\neq j}\mathbf{x}_k\theta_k\right)}{\mathbf{x}_j^\top\mathbf{x}_j+\lambda} = \frac{\mathbf{x}_j^\top\left(\mathbf{y}-\sum_{k=1}^{p}\mathbf{x}_k\theta_k+\mathbf{x}_j\theta_j\right)}{\|\mathbf{x}_j\|_2^2+\lambda}$$

Ridge descente par coordonnées (II)

Mise à jour intelligente en conservant dans une variable les résidus courant $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$
choisir une coordonnées j et faire

$$\begin{aligned} r^{\text{int}} &\leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \theta_j^{(k+1)} &\leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}} / (\|\mathbf{x}_j\|_2^2 + \lambda) \\ r^{(k+1)} &= r^{(k)} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)} \end{aligned}$$

Impact mémoire faible :

- stocker un vecteur de résidu de taille n
- stocker un vecteur θ de taille p

Rem: Intérêt de normaliser à $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$

Lasso : descente par coordonnées

$$\arg\min_{\boldsymbol{\theta}\in\mathbb{R}^p} f(\boldsymbol{\theta}) \text{ pour } f(\boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|^2 + \lambda\sum_{j=1}^{p}|\theta_j|$$

Minimise en θ_j avec les autres θ_k $(k \neq j)$ fixes

$$\begin{aligned}
\hat{\theta}_j &= \arg\min_{\theta_j\in\mathbb{R}} f(\theta_1, \cdots, \theta_p) \\
&= \arg\min_{\theta_j\in\mathbb{R}} \frac{1}{2}\|\mathbf{y} - \sum_{k\neq j}\theta_k\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j\theta_j\|^2 + \lambda\sum_{k\neq j}|\theta_j| + \lambda|\theta_j| \\
&= \arg\min_{\theta_j\in\mathbb{R}} \frac{1}{2}\|\mathbf{x}_j\|^2\theta_j^2 - \langle y - \sum_{k\neq j}\theta_k\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_j\rangle\theta_j + \lambda|\theta_j| \\
&= \arg\min_{\theta_j\in\mathbb{R}} \|\mathbf{x}_j\|^2\left[\frac{1}{2}\left(\theta_j - \|\mathbf{x}_j\|^{-2}\langle y - \sum_{k\neq j}\theta_k\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_j\rangle\right)^2 + \frac{\lambda}{\|\mathbf{x}_j\|^2}|\theta_j|\right]
\end{aligned}$$

Rappel : $\eta_{\mathrm{ST},\lambda}(z) = \arg\min_{x\in\mathbb{R}} x \mapsto \frac{1}{2}(z - x)_2^2 + \lambda|x|$

Lasso : descente par coordonnées (II)

Solution :

$$\hat{\theta}_j = \eta_{\mathrm{ST},\lambda/\|\mathbf{x}_\mathrm{j}\|^2}\left(\|\mathbf{x}_j\|^{-2}\langle y - \sum_{k\neq j}\theta_k\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_j\rangle\right)$$

Mise à jour intelligente en conservant dans une variable les résidus courant $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$
choisir une coordonnées j et faire

$$\begin{aligned} r^{\mathrm{int}} &\leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j\theta_j^{(k)} \\ \theta_j^{(k+1)} &\leftarrow \eta_{\mathrm{ST},\lambda/\|\mathbf{x}_\mathrm{j}\|^2}\left(\mathbf{x}_j^\top r^{\mathrm{int}}/\|\mathbf{x}_j\|^2\right) \\ r^{(k+1)} &= r^{int} - \mathbf{x}_j\theta_j^{(k+1)} \end{aligned}$$

Impact mémoire faible :

- stocker un vecteur de résidu de taille n
- stocker un vecteur θ de taille p

<u>Rem</u>: Intérêt de normaliser à $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$

Sommaire

Lasso-Positif

Exo: Proposer une manière de résoudre le problème Lasso avec une contrainte de positivité sur les coefficients du Lasso :

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\text{Lasso+}} = \mathop{\arg\min}_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_+^p} \left(\underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2}_{\textbf{attache aux données}} + \underbrace{\lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_1}_{\textbf{régularisation}} \right)}$$

Optimisation : autres méthodes

D'autres algorithmes peuvent être utilisés pour construire une/les solutions du Lasso :

- LARS Efron *et al.* (2004) pour le chemin entier
- méthodes de gradient proximal, Forward-Backward, de type Seuillage Doux Itératif *cf.* Beck et Teboulle(2009)

Ces dernières méthodes seront vues en cours de *machine learning* avancé (*e.g.*, INF 341), ou en cours de signal avancé)

Références I

- F. Bach.
  Bolasso : model consistent Lasso estimation through the bootstrap.
  In *ICML*, 2008.
- A. Beck and M. Teboulle.
  A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems.
  SIAM J. Imaging Sci., 2(1) :183–202, 2009.
- P. Bühlmann and S. van de Geer.
  Statistics for high-dimensional data.
  Springer Series in Statistics. Springer, Heidelberg, 2011.
  Methods, theory and applications.
- E. J. Candès, M. B. Wakin, and S. P. Boyd.
  Enhancing sparsity by reweighted l_1 minimization.
  J. Fourier Anal. Applicat., 14(5-6) :877–905, 2008.

Références II

- B. Efron, T. Hastie, I. M. Johnstone, and R. Tibshirani.
  Least angle regression.
  Ann. Statist., 32(2) :407–499, 2004.
  With discussion, and a rejoinder by the authors.
- Bien J, J. Taylor, and R. Tibshirani.
  A lasso for hierarchical interactions.
  Ann. Statist., 41(3) :1111–1141, 2013.
- N. Meinshausen and P. Bühlmann.
  Stability selection.
  Journal of the Royal Statistical Society : Series B (Statistical Methodology), 72(4) :417–473, 2010.
- N. Parikh, S. Boyd, E. Chu, B. Peleato, and J. Eckstein.
  Proximal algorithms.
  Foundations and Trends in Machine Learning, 1(3) :1–108, 2013.

Références III

- N. Simon, J. Friedman, T. Hastie, and R. Tibshirani.
  A sparse-group lasso.
  J. Comput. Graph. Statist., 22(2) :231–245, 2013.
- R. Tibshirani.
  Regression shrinkage and selection via the lasso.
  J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 58(1) :267–288, 1996.
- P. Tseng.
  Convergence of a block coordinate descent method for nondifferentiable minimization.
  J. Optim. Theory Appl., 109(3) :475–494, 2001.
- M. Yuan and Y. Lin.
  Model selection and estimation in regression with grouped variables.
  J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 68(1) :49–67, 2006.
- H. Zou and T. Hastie.
  Regularization and variable selection via the elastic net.
  J. Roy. Statist. Soc. Ser. B, 67(2) :301–320, 2005.

Références IV

- H. Zou.

  The adaptive lasso and its oracle properties.

  J. Am. Statist. Assoc., 101(476) :1418–1429, 2006.