MS BGD MDI 720 : Statistiques

Joseph Salmon

http://josephsalmon.eu Télécom Paristech, Institut Mines-Télécom

Plan

Optimisation pour le Lasso Descente par coordonnée Alternatives

Sommaire

Optimisation pour le Lasso Descente par coordonnée Alternatives

Objectif : trouver une solution (approchée!) de $\underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\min} f(\boldsymbol{\theta})$

Algorithme: Descente par coordonnée

Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)

Initialisation : k = 0 et $\boldsymbol{\theta}^{(k)} = 0 \in \mathbb{R}^p$

Objectif : trouver une solution (approchée!) de $\underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{min}} f(\boldsymbol{\theta})$

```
Algorithme: Descente par coordonnée
```

Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)

Initialisation : k = 0 et $\boldsymbol{\theta}^{(k)} = 0 \in \mathbb{R}^p$

pour $k = 1, \dots, K$ faire

Objectif : trouver une solution (approchée!) de $\underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\operatorname{min}} f(\boldsymbol{\theta})$

```
Algorithme : Descente par coordonnée
```

```
Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)
```

Initialisation : k = 0 et $\boldsymbol{\theta}^{(k)} = 0 \in \mathbb{R}^p$

pour $k = 1, \dots, K$ faire

$$\theta_1^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_1 \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_1, \theta_2^{(k-1)}, \theta_3^{(k-1)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_p^{(k-1)})$$

```
Algorithme : Descente par coordonnée
```

```
Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)
Initialisation : k=0 et \boldsymbol{\theta}^{(k)}=0\in\mathbb{R}^p

pour k=1,\ldots,K faire
 \begin{vmatrix} \theta_1^{(k)} \leftarrow \arg\min_{\boldsymbol{\theta}_1\in\mathbb{R}} f(\boldsymbol{\theta}_1 &, \boldsymbol{\theta}_2^{(k-1)}, \boldsymbol{\theta}_3^{(k-1)}, \ldots, \boldsymbol{\theta}_{p-1}^{(k-1)}, \boldsymbol{\theta}_p^{(k-1)}) \\ \theta_2^{(k)} \leftarrow \arg\min_{\boldsymbol{\theta}_1\in\mathbb{R}} f(\boldsymbol{\theta}_1^{(k)}, \boldsymbol{\theta}_2 &, \boldsymbol{\theta}_3^{(k-1)}, \ldots, \boldsymbol{\theta}_{p-1}^{(k-1)}, \boldsymbol{\theta}_p^{(k-1)}) \end{vmatrix}
```

```
Algorithme: Descente par coordonnée
Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)
Initialisation : k = 0 et \boldsymbol{\theta}^{(k)} = 0 \in \mathbb{R}^p
pour k = 1, \ldots, K faire
        \theta_1^{(k)} \leftarrow \arg\min f(\theta_1, \theta_2^{(k-1)}, \theta_3^{(k-1)}, \dots, \theta_{n-1}^{(k-1)}, \theta_n^{(k-1)})
      \theta_{1}^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_{2} \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{}, \theta_{3}^{(k-1)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
\theta_{3}^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_{2} \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{(k)}^{}, \theta_{3}^{(k)}^{}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
```

```
Algorithme: Descente par coordonnée
Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)
Initialisation: k=0 et \boldsymbol{\theta}^{(k)}=0\in\mathbb{R}^p
pour k = 1, \ldots, K faire
          \theta_1^{(k)} \leftarrow \arg\min f(\theta_1, \theta_2^{(k-1)}, \theta_3^{(k-1)}, \dots, \theta_{n-1}^{(k-1)}, \theta_n^{(k-1)})
        \theta_{1}^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_{2} \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{0}, \theta_{3}^{(k-1)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
\theta_{2}^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_{2} \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{(k)}, \theta_{3}^{(k)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
\theta_{3}^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_{2} \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{(k)}, \theta_{3}^{(k)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
       \theta_p^{(k)} \leftarrow \underset{\boldsymbol{\theta}_p \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} f(\theta_1^{(k)}, \theta_2^{(k)}, \theta_3^{(k)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k)}, \boldsymbol{\theta}_p)
```

Objectif : trouver une solution (approchée!) de $\arg\min f(\boldsymbol{\theta})$

```
Algorithme: Descente par coordonnée
Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)
Initialisation: k=0 et \boldsymbol{\theta}^{(k)}=0\in\mathbb{R}^p
pour k = 1, \ldots, K faire
       \theta_1^{(k)} \leftarrow \arg\min f(\theta_1, \theta_2^{(k-1)}, \theta_3^{(k-1)}, \dots, \theta_{n-1}^{(k-1)}, \theta_n^{(k-1)})
     \theta_{1}^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_{2} \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg \, min}} f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{(k)}), \theta_{3}^{(k-1)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
     \theta_3^{(k)} \leftarrow \arg\min_{\boldsymbol{\theta}} f(\boldsymbol{\theta}^{(k)}, \boldsymbol{\theta}_2^{(k)}), \theta_3, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \boldsymbol{\theta}_p^{(k-1)})
    \vdots \\ \theta_p^{(k)} \leftarrow \underset{\theta_p \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} f(\theta_1^{(k)}, \theta_2^{(k)} , \theta_3^{(k)} , \dots, \theta_{p-1}^{(k)} , \theta_p )
Sorties : \theta^{(K)}
```

Objectif : trouver une solution (approchée!) de $\arg\min f(\boldsymbol{\theta})$

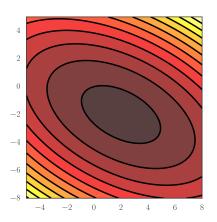
```
Algorithme: Descente par coordonnée
Entrées : f, nombre d'« époques » K (ou de « passes »)
Initialisation: k=0 et \boldsymbol{\theta}^{(k)}=0\in\mathbb{R}^p
pour k = 1, \ldots, K faire
      \theta_1^{(k)} \leftarrow \arg\min f(\theta_1, \theta_2^{(k-1)}, \theta_3^{(k-1)}, \dots, \theta_{n-1}^{(k-1)}, \theta_n^{(k-1)})
     \theta_{1}^{(k)} \leftarrow \arg\min f(\theta_{1}^{(k)}, \theta_{2}^{(k)}, \theta_{3}^{(k-1)}, \dots, \theta_{p-1}^{(k-1)}, \theta_{p}^{(k-1)})
     \theta_3^{(k)} \leftarrow \arg\min f(\theta^{(k)}, \theta_2^{(k)}), \theta_3^{(k)}, \dots, \theta_{n-1}^{(k-1)}, \theta_n^{(k-1)})
    \vdots \\ \theta_p^{(k)} \leftarrow \underset{\boldsymbol{\theta}_p \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} f(\theta_1^{(k)}, \theta_2^{(k)} , \theta_3^{(k)} , \dots, \theta_{p-1}^{(k)} , \boldsymbol{\theta}_p )
```

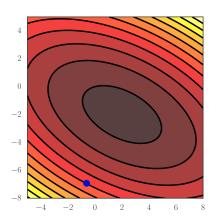
Sorties : $\theta^{(K)}$

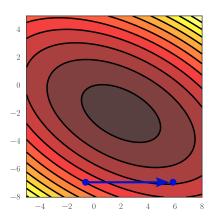
Critères d'arrêts : itérés stables, objectifs stables, saut de dualité . . .

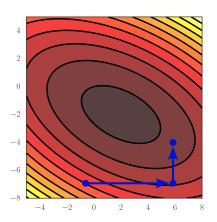
Intérêt

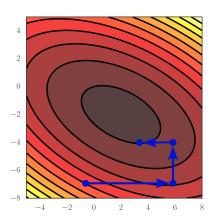
- la descente par coordonnée peut être particulièrement utile quand p est grand
- parcours possible : cyclique, aléatoire, avec/sans remise, etc.
- on peut faire le même raisonnement par bloc : on ne met plus à jour une coordonnée, mais tout un groupe/bloc (≥ : Block Coordinate Descent)
- mathématiquement cet algorithme converge vers un minimum (sous certaines conditions : fonction lisse, ou bien non lisse mais séparable cf. Tseng (2001)), cf. la suite

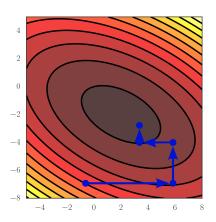


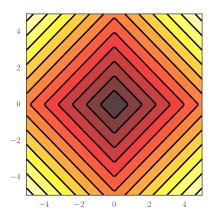


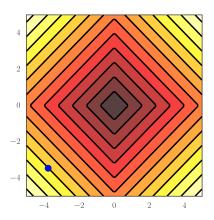


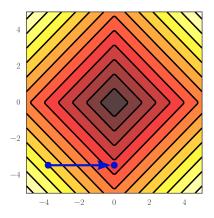


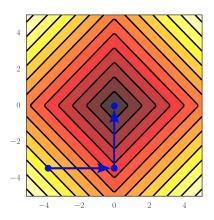


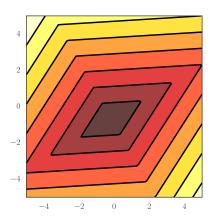


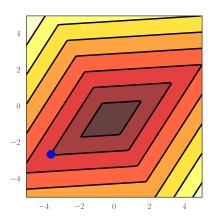


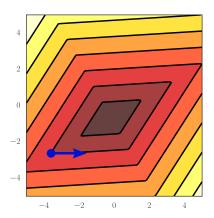


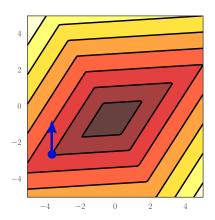












Moindre carrés

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

$$\mathsf{Rappel} : \nabla f(\boldsymbol{\theta}) = X^{\top}(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_{1}^{\top}(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) \\ \vdots \\ \mathbf{x}_{p}^{\top}(X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial \theta_{1}}(\boldsymbol{\theta}) \\ \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial \theta_{p}}(\boldsymbol{\theta}) \end{pmatrix}$$

Minimiser en θ_i avec les autres θ_k , pour $k \neq j$, fixes :

$$0 = \frac{\partial f}{\partial \theta_j}(\boldsymbol{\theta}) = \mathbf{x}_j^{\top} (X\boldsymbol{\theta} - \mathbf{y}) = \mathbf{x}_j^{\top} \left(\mathbf{x}_j \theta_j + \sum_{k \neq j} \mathbf{x}_k \theta_k - \mathbf{y} \right)$$
$$\Leftrightarrow \theta_j = \frac{\mathbf{x}_j^{\top} \left(\mathbf{y} - \sum_{k \neq j} \mathbf{x}_k \theta_k \right)}{\mathbf{x}_j^{\top} \mathbf{x}_j} = \frac{\mathbf{x}_j^{\top} \left(\mathbf{y} - \sum_{k=1}^p \mathbf{x}_k \theta_k + \mathbf{x}_j \theta_j \right)}{\|\mathbf{x}_j\|_2^2}$$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\pmb{\theta}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$

Pour chaque
$$j \in [\![1,p]\!], \text{ faire}: \ \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\mathrm{int}}/\|\mathbf{x}_j\|_2^2$$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $oldsymbol{ heta}^{(k)}$

$$\begin{split} r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \text{Pour chaque } j \in [\![1,p]\!], \text{ faire } : \; \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}} / \|\mathbf{x}_j\|_2^2 \\ r^{(k+1)} \leftarrow r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)} \end{split}$$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $oldsymbol{ heta}^{(k)}$

$$\begin{split} r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \text{Pour chaque } j \in [\![1,p]\!], \text{ faire } : \; \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}} / \|\mathbf{x}_j\|_2^2 \\ r^{(k+1)} \leftarrow r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)} \end{split}$$

Impact mémoire faible :

- stocker un vecteur de résidus de taille n
- stocker un vecteur d'estimation de taille p

<u>Rem</u>: $\|\mathbf{x}_i\|_2^2 = 1$ utile en optimisation (\neq en statistique)

Ridge : descente par coordonnée

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

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

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 coordonnée (II)

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$

$$r^{\mathrm{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$
 Pour chaque $j \in [\![1,p]\!], \ \mathrm{faire}: \ \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\mathrm{int}}/(\|\mathbf{x}_j\|_2^2 + \lambda)$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

$$\begin{split} r^{\mathrm{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \text{Pour chaque } j \in [\![1,p]\!], \text{ faire } : \; \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\mathrm{int}}/(\|\mathbf{x}_j\|_2^2 + \lambda) \\ r^{(k+1)} \leftarrow r^{\mathrm{int}} - \mathbf{x}_j \theta_i^{(k+1)} \end{split}$$

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$

$$\begin{split} r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \text{Pour chaque } j \in [\![1,p]\!], \text{ faire } : \; \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}}/(\|\mathbf{x}_j\|_2^2 + \lambda) \\ r^{(k+1)} \leftarrow r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)} \end{split}$$

Impact mémoire faible :

- stocker un vecteur de résidus de taille n
- stocker un vecteur d'estimation de taille p

Rem: $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$ utile en optimisation (\neq en statistique)

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

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

$$\hat{\theta}_j = \operatorname*{arg\,min}_{\theta \, \sigma^{\mathrm{TD}}} f(\theta_1, \dots, \theta_p)$$

$$= \mathop{\arg\min}_{\theta_j \in \mathbb{R}} \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - \sum_{k \neq j} \theta_k \mathbf{x}_k - \mathbf{x}_j \theta_j\|^2 + \lambda \sum_{k \neq j} |\theta_k| + \lambda |\theta_j|$$

$$= \underset{\theta_j \in \mathbb{R}}{\operatorname{arg\,min}} \frac{1}{2} \|\mathbf{x}_j\|^2 \theta_j^2 - \langle y - \sum_{k \neq j} \theta_k \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_j \rangle \theta_j + \lambda |\theta_j|$$

$$= \operatorname*{arg\,min}_{\theta_j \in \mathbb{R}} \|\mathbf{x}_j\|^2 \left[\frac{1}{2} \left(\theta_j - \|\mathbf{x}_j\|^{-2} \langle y - \sum_{k \neq j} \theta_k \mathbf{x}_k, \mathbf{x}_j \rangle \right)^2 + \frac{\lambda}{\|\mathbf{x}_j\|^2} |\theta_j| \right]$$

$$\underline{\mathsf{Rappel}}: \quad \eta_{\mathrm{ST},\lambda}(z) = \mathop{\arg\min}_{t \in \mathbb{R}} \frac{1}{2} (z-t)^2 + \lambda |t|$$

Solution:

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

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $\boldsymbol{\theta}^{(k)}$

Solution:

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

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans $oldsymbol{ heta}^{(k)}$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

Solution:

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

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

Solution:

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

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$

Pour chaque $j \in [\![1,p]\!], \text{ faire}: \theta_j^{(k+1)} \leftarrow \eta_{\mathrm{ST},\lambda/\|\mathbf{x}_j\|^2} \left(\mathbf{x}_j^\top r^{\mathrm{int}}/\|\mathbf{x}_j\|^2\right)$

Solution:

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

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${\pmb{\theta}}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$
 Pour chaque $j \in [\![1,p]\!]$, faire : $\theta_j^{(k+1)} \leftarrow \eta_{\text{ST},\lambda/\|\mathbf{x}_j\|^2} \left(\mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}}/\|\mathbf{x}_j\|^2\right)$
$$r^{(k+1)} \leftarrow r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)}$$

Solution:

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

Mise à jour intelligente : stocker les résidus courants $r^{(k)}$ et les coefficients dans ${m heta}^{(k)}$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$
 Pour chaque $j \in [\![1,p]\!]$, faire : $\theta_j^{(k+1)} \leftarrow \eta_{\text{ST},\lambda/\|\mathbf{x}_j\|^2} \left(\mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}}/\|\mathbf{x}_j\|^2\right)$
$$r^{(k+1)} \leftarrow r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)}$$

Impact mémoire faible :

- stocker un vecteur de résidus de taille n
- ightharpoonup stocker un vecteur d'estimation de taille p

Rem: $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$ utile en optimisation (\neq en statistique)

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda,\gamma}^{\mathrm{pen}} = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p} \quad \left(\quad \quad \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 \quad \quad + \underbrace{\sum_{j=1}^p \mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}(|\theta_j|)}_{\text{régularisation}} \right)$$

Même approche (mais sans garantie de convergence), si $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda,\gamma}^{\mathrm{pen}} = \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\mathrm{arg\,min}} \quad \left(\qquad \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 \qquad + \underbrace{\sum_{j=1}^p \mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}(|\theta_j|)}_{\text{régularisation}} \right)$$

Même approche (mais sans garantie de convergence), si $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda,\gamma}^{\mathrm{pen}} = \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\mathrm{arg\,min}} \quad \left(\qquad \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 \qquad + \underbrace{\sum_{j=1}^p \mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}(|\theta_j|)}_{\text{régularisation}} \right)$$

Même approche (mais sans garantie de convergence), si $\|\mathbf{x}_j\|_2^2 = 1$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$

Pour chaque $j \in [1, p]$, faire :

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda,\gamma}^{\mathrm{pen}} = \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\mathrm{arg\,min}} \quad \left(\qquad \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 \qquad + \underbrace{\sum_{j=1}^p \mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}(|\theta_j|)}_{\text{régularisation}} \right)$$

Même approche (mais sans garantie de convergence), si $\|\mathbf{x}_i\|_2^2 = 1$

$$r^{\text{int}} \leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)}$$
 Pour chaque $j \in [\![1,p]\!]$, faire : $\theta_j^{(k+1)} \leftarrow \eta_{\text{pen}_{\lambda,\gamma}} \left(\mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}}\right)$

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda,\gamma}^{\mathrm{pen}} = \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p}{\min} \quad \left(\quad \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_2^2 \quad + \underbrace{\sum_{j=1}^p \mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}(|\boldsymbol{\theta}_j|)}_{\text{régularisation}} \right)$$

Même approche (mais sans garantie de convergence), si $\|\mathbf{x}_i\|_2^2 = 1$

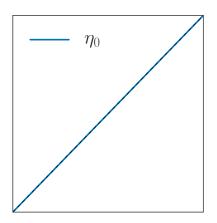
$$\begin{split} r^{\text{int}} &\leftarrow r^{(k)} + \mathbf{x}_j \theta_j^{(k)} \\ \text{Pour chaque } j \in [\![1,p]\!], \text{ faire } : \; \theta_j^{(k+1)} &\leftarrow \eta_{\text{pen}_{\lambda,\gamma}} \left(\mathbf{x}_j^\top r^{\text{int}}\right) \\ r^{(k+1)} &\leftarrow r^{\text{int}} - \mathbf{x}_j \theta_j^{(k+1)} \end{split}$$

où
$$\eta_{\mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}}(z) = \operatorname*{arg\,min}_{t\in\mathbb{R}} \frac{1}{2} (z-t)^2 + \mathrm{pen}_{\lambda,\gamma}(t)$$

voir par exemple Breheny et Huang (2011)

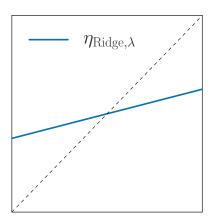
Régularisation en 1D : Aucune

$$\eta_0(z) = z$$



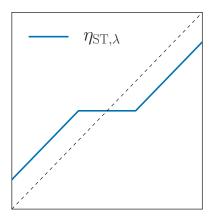
Régularisation en 1D : Ridge

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



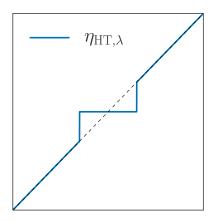
Régularisation en 1D : Lasso

$$\eta_{\text{ST},\lambda}(z) = \text{sign}(z)(|z| - \lambda)_{+}$$



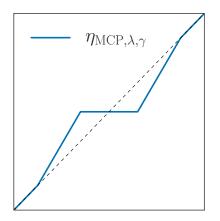
Régularisation en 1D : ℓ_0

$$\eta_{\mathrm{HT},\lambda^2/2}(z) = z \mathbb{1}_{|z| \geqslant \lambda}$$



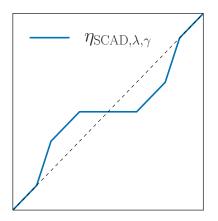
Régularisation en 1D : MCP

$$\eta_{\text{MCP},\lambda,\gamma}(z) = \begin{cases} \text{sign}(z)(|z|-\lambda)_+/(1-1/\gamma) & \text{ si } |z| \leqslant \gamma \lambda \\ z & \text{ si } |z| > \gamma \lambda \end{cases}$$



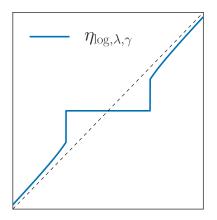
Régularisation en 1D : SCAD

$$\eta_{\mathrm{SCAD},\lambda,\gamma}(z) = \begin{cases} \mathrm{sign}(z)(|z|-\lambda)_+/(1-1/\gamma) & \text{si } |z| \leqslant 2\lambda \\ ([\gamma-1)z - \mathrm{sign}(z)\gamma\lambda]/(\gamma-2) & \text{si } 2\lambda \leqslant |z| \leqslant \gamma\lambda \\ z & \text{si } |z| > \gamma\lambda \end{cases}$$



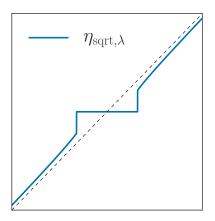
Régularisation en 1D : \log

$$\eta_{\log,\lambda}(z) = \dots$$



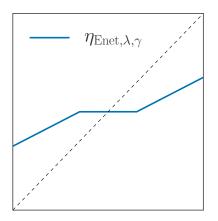
Régularisation en 1D : sqrt

$$\eta_{\mathrm{sqrt},\lambda}(z) = \dots$$



Régularisation en 1D : Enet

$$\eta_{Enet,\lambda,\gamma}(z) = \dots$$

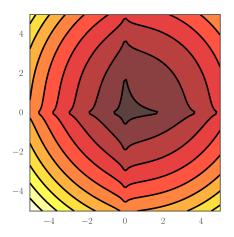


Lasso-Positif

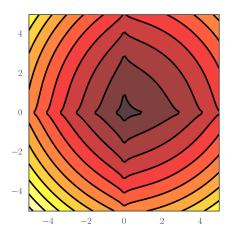
Exo: Proposer une manière de résoudre le problème Lasso avec une contrainte de positivité sur les coefficients

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\lambda}^{\mathrm{Lasso+}} = \underset{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}_{+}^{p}}{\mathrm{arg\,min}} \quad \left(\quad \underbrace{\frac{1}{2}\|\mathbf{y} - X\boldsymbol{\theta}\|_{2}^{2}}_{\text{attache aux donn\'ees}} \quad + \quad \underbrace{\lambda\|\boldsymbol{\theta}\|_{1}}_{\text{r\'egularisation}} \right)$$

Lignes de niveaux pour log



Lignes de niveaux pour sqrt



Sommaire

Optimisation pour le Lasso

Descente par coordonnée

Alternatives

Optimisation: autres méthodes

D'autres algorithmes peuvent être utilisés pour construire une solution approchée du Lasso :

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

Ces dernières méthodes seront vues en INFMDI 341

Références I

▶ P. Breheny and J. Huang.

Coordinate descent algorithms for nonconvex penalized regression, with applications to biological feature selection.

5(1):232, 2011.

A. Beck and M. Teboulle.

A fast iterative shrinkage-thresholding algorithm for linear inverse problems. *SIAM J. Imaging Sci.*, 2(1):183–202, 2009.

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.

▶ P. Tseng.

Convergence of a block coordinate descent method for nondifferentiable minimization.

J. Optim. Theory Appl., 109(3):475-494, 2001.