Le Lasso
Le gradient proximal

S.Canu
AML ITI /INSA de Rouen Normandie

14 octobre 2024

Le Lasso

- Données
  - $X \in \mathbb{R}^{n \times p}$ les p variables observées n fois
  - $y \in \mathbb{R}^n$ la variable réponse
- Inconnues
  - $\beta \in \mathbb{R}^p$
- hypothèses : pas de biais (pas de terme constant)
  - $mean(X) = 0$
  - $\|X_j\|^2 = 1$
  - $mean(y) = 0$

le cout pénalisé

$$J_\lambda(\beta) \; = \; \tfrac{1}{2}\|X\beta - y\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \; ,$$

Les conditions d'optimalité

$$0 \in \partial J_\lambda(\beta) \; = \; X^\top(X\beta - y) + \lambda\partial(\|\beta\|_1) \; ,$$

L'algorithme du gradient proximal

Le cout du lasso : $f(\beta) = J_\lambda(\beta) = \underbrace{g(\beta)}_{} + \underbrace{h(\beta)}_{}$.

- $g(\beta)$ convexe et différentiable
- $h(\beta)$ convexe et sous-différentiable

Algorithme du gradient proximal

Initialisation : par exemple $\beta^0 = 0$
choisir un pas t,
Tant qu'on n'a pas convergé....

$$\beta^{k+1} = \text{Prox}_{th(\beta)}\left(\beta^k - t\nabla_\beta g(\beta^k)\right)$$

L'algorithme du gradient proximal pour le Lasso

Le cout du lasso : $f(\beta) = J_\lambda(\beta) = \underbrace{g(\beta)}_{\frac{1}{2}\|X\beta - y\|^2} + \underbrace{h(\beta)}_{\lambda\|\beta\|_1}$.

- $g(\beta) = \frac{1}{2}\|X\beta - y\|^2$ convexe et différentiable
- $h(\beta) = \lambda\|\beta\|_1$ convexe et sous-différentiable

Algorithme du gradient proximal

Initialisation : par exemple $\beta^0 = 0$
choisir un pas t, par exemple $t = 2/\|X^T X\|$
Tant qu'on n'a pas convergé....

$$\begin{aligned} \beta^{k+1} &= \text{Prox}_{th(\beta)}\left(\beta^k - t\nabla_\beta g(\beta^k)\right) \\ \beta^{k+1} &= \text{Prox}_{t\lambda\|\beta\|_1}\left(\beta^k - tX^t(X\beta^k - y)\right) \end{aligned}$$

idée 1 : le proximal L1

Le proximal de la fonction $h(x)$ au point w est

$$prox_h(w) = argmin_u \quad h(u) + \frac{1}{2}||u - w||^2$$

Le proximal du cout L1 $h(x) = ||u||_1$ au point w est

$$prox_{l1}(w) = argmin_u \quad ||u||_1 + \frac{1}{2}||u - w||^2$$

$$prox_{l1}(w) = sign(w)max(|w| - 1, 0)$$

Le proximal de la fonction $h(x) = \lambda||u||_1$ au point w est

$$prox_{l1}(w, \lambda) = argmin_u \quad \lambda||u||_1 + \frac{1}{2}||u - w||^2$$

$$prox_{l1}(w, \lambda) = sign(w)max(|w| - \lambda, 0)$$

idée 2 : la linéarisation

$$\begin{array}{rccc} J: & \mathbb{R}^p & \longrightarrow & \mathbb{R} \\ & \boldsymbol{x} & \longmapsto & J(\boldsymbol{x}) \end{array}$$

Développement de Taylor au premier ordre

$$\begin{array}{cccc} J(\beta) & = & J(\beta^0) & +(\beta-\beta^0)^t\nabla_\beta J(\beta^0) & +o(\|\beta-\beta^0\|) \\ \frac{1}{2}\|X\beta-y\|^2 & = & \frac{1}{2}\|X\beta^0-y\|^2 & +(\beta-\beta^0)^tX^t(X\beta^0-y) & +o(\|\beta-\beta^0\|) \end{array}$$

ou, avec $v=(\beta-\beta^0)$

$$J(\beta)=J(\beta^0)+v^t\nabla_\beta J(\beta^0)+\int_0^1\left(\nabla J(\beta^0+tv)-\nabla J(\beta^0)\right)^T v\,dt$$

Développement de Taylor au second ordre

$$J(\beta)=J(\beta)+J(\beta^0)+(\beta-\beta^0)^t\nabla_\beta J(\beta^0)+\frac{1}{2}(\beta-\beta^0)^tH(\beta-\beta^0)+o(\|\beta-\beta^0\|^2)$$

idée 3 : la méthode de la région de confiance

Pour un β^0 donné

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{\beta} & \frac{1}{2}\|X\beta - y\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \ , \\ \text{avec} & \|\beta - \beta^0\|^2 \leq \varepsilon \end{array}$$

$$\min_{\beta} \frac{1}{2}\|X\beta - y\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \ + \frac{1}{2t}(\|\beta - \beta^0\|^2 - \varepsilon)$$

idée 2+idée 3

Pour un β^0 donné

$$\min_{\beta} \tfrac{1}{2}\|X\beta - y\|^2 + \lambda\|\beta\|_1 \; + \frac{1}{2t}(\|\beta - \beta^0\|^2 - \varepsilon)$$

$$\begin{aligned} J(\beta) = \tfrac{1}{2}\|X\beta - y\|^2 \quad &\approx J(\beta^0) + (\beta - \beta^0)^t \nabla_\beta J(\beta^0) \\ &\approx \tfrac{1}{2}\|X\beta^0 - y\|^2 + (\beta - \beta^0)^t X^t (X\beta^0 - y) \end{aligned}$$

$$\min_{\beta} (\beta - \beta^0)^t X^t (X\beta^0 - y) + \lambda\|\beta\|_1 \; + \frac{1}{2t}\|\beta - \beta^0\|^2$$

$$\min_{\beta} \lambda\|\beta\|_1 \; + \frac{1}{2t}\|\beta - \beta^0 + tX^t(X\beta^0 - y)\|^2$$

idée 2+idée 3+idée 1

Pour un β^0 donné

$$\min_{\beta} \; t\lambda\|\beta\|_1 \; + \frac{1}{2}\|\beta - \beta^0 + tX^t(X\beta^0 - y)\|^2$$

$$\begin{array}{ll} \min\limits_{\beta} & t\lambda\|\beta\|_1 \; + \frac{1}{2}\|\beta - v\|^2 \\ avec & v = \beta^0 - tX^t(X\beta^0 - y) \end{array}$$

La solution est donnée par :

$$\beta = \text{Prox}_{t\lambda\|\beta\|_1}\left(\beta^0 - tX^t(X\beta^0 - y)\right)$$

L'algorithme du gradient proximal

Pour un β^0 donné

$t = \frac{2}{\|X^t X\|}$

Tant qu'on n'a pas convergé....

$$\begin{aligned} v &= \beta^k - tX^t(X\beta^k - y) \\ \beta^{k+1} &= \arg\min_{\beta} t\lambda\|\beta\|_1 + \frac{1}{2}\|\beta - v\|^2 \\ &= sign(v)max(|v| - t\lambda, 0) \end{aligned}$$

```
def proxl1(w,lam):
    return np.sign(w)*np.maximum((np.abs(w)-lam),0)

stepsize = 1/np.linalg.norm(X.T@X)
for i in range(nb_itermax):
    grad = -X.T@(y-X@w)
    w = w - stepsize*grad
    w = prox(w,stepsize*lambd)
```

Comment choisir t ?

J est gradient Lipschitz s'il existe une constante $0 < L$ telle que, $\forall \beta, \beta^0$

$$\|\nabla_\beta J(\beta) - \nabla_\beta J(\beta^0)\| \leq L\|\beta - \beta^0\|$$

Choix de t : argument de convergence

Si

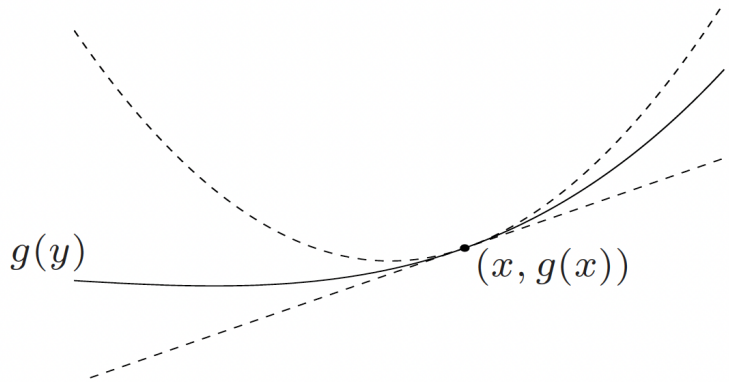
$$t \leq \frac{2}{L}$$

L'algorithme du gradient proximal converge

```
stepsize = 2./np.linalg.norm(X.T@X)
```

Le Lasso

Quadratic upper bound from Lipschitz property



- affine lower bound from convexity

$$g(y) \geq g(x) + \nabla g(x)^T (y - x) \qquad \forall x, y$$

- quadratic upper bound from Lipschitz property

$$g(y) \leq g(x) + \nabla g(x)^T (y - x) + \frac{L}{2} \|y - x\|_2^2 \qquad \forall x, y$$

The gradient Lipschitz Property

- g est gradient Lipschitz s'il existe L :

$$\|\nabla g(y) - \nabla g(x)\| \leq L \|y - x\|$$

Exemple $g(\beta) = \frac{1}{2}\|X\beta - y\|^2, \qquad \nabla g(\beta) = X^T(X\beta - y)$

$$\|\nabla g(y) - \nabla g(x)\| = \|X^T X(y - x)\| \leq \underbrace{\|X^T X\|}_{=L} \|y - x\|$$

- $v = y - x$

$$\begin{aligned} g(y) &= g(x) + \nabla g(x)^T v + \int_0^1 (\nabla g(x + tv) - \nabla g(x))^T v dt \\ &\leq g(x) + \nabla g(x)^T v + \int_0^1 \|\nabla g(x + tv) - \nabla g(x)\| \|v\| dt \\ &\leq g(x) + \nabla g(x)^T v + \int_0^1 tL\|v\|^2 dt \\ &\leq g(x) + \nabla g(x)^T v + \frac{L}{2}\|v\|^2 dt \end{aligned}$$

The Proximal Operator Property

Theorem (Proximal Operator Property)

Let $h : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R} \cup \{\infty\}$ be a proper, lower semicontinuous, convex function. For any $x \in \mathbb{R}^n$ and $t > 0$, let $z = prox_{th}(x - t\nabla g(x))$. Then for all $y \in \mathbb{R}^n$:

$$\langle z - (x - t\nabla g(x)), z - y \rangle + th(z) \leq th(y)$$

Démonstration.

1. The proximal operator : $\text{prox}_h(v) = \arg\min_u \left\{ h(u) + \frac{1}{2}\|v - u\|^2 \right\}$
2. Let $z = \text{prox}_h(v)$. Optimality condition $0 \in \partial h(z) + (z - v)$
3. This optimality condition can be rewritten as : $v - z \in \partial h(z)$
4. by definition of the subdifferential : $\partial h(z) = \{\delta : h(y) \geq h(z) + \langle \delta, y - z \rangle \text{ for all } y\}$
5. Applying this definition with $v - z \in \partial h(z)$: $h(y) \geq h(z) + \langle v - z, y - z \rangle \text{ for all } y$
6. Rearranging this inequality : $\langle z - v, z - y \rangle + h(z) \leq h(y) \text{ for all } y$
7. When $v = x - t\nabla g(x)$ and $z = \text{prox}_{th}(v)$ we have :

$$\langle z - (x - t\nabla g(x)), z - y \rangle + th(z) \leq th(y) \text{ for all } y$$

This last inequality is precisely the Proximal Operator Property, which completes the proof. □

Le Lasso

Le cout du lasso : $J_\lambda(\beta) = \underbrace{g(\beta)}_{\frac{1}{2}\|X\beta-y\|^2} + \underbrace{h(\beta)}_{\lambda\|\beta\|_1}$.

- $g(\beta) = \frac{1}{2}\|X\beta - y\|^2$ is L-Lipshitz

$$\frac{1}{2}\|X\beta^{k+1}-y\|^2 \leq \frac{1}{2}\|X\beta^k-y\|^2+(X\beta-y)^T X(\beta^{k+1}-\beta^k)+\frac{L}{2}\|\beta^{k+1}-\beta^k\|^2$$

- Proximal operator property

$$\begin{array}{rcl} \langle \beta^{k+1} - (\beta^k - t\nabla g(\beta^k)), \beta^{k+1} - \beta^k\rangle + t\lambda\|\beta^{k+1}\|_1 & \leq & t\lambda\|\beta^k\|_1 \\ \frac{1}{t}\|\beta^{k+1} - \beta^k\|^2 + (X\beta - y)^T X(\beta^{k+1} - \beta^k) + \lambda\|\beta^{k+1}\|_1 & \leq & \lambda\|\beta^k\|_1 \end{array}$$

En combinant puis réarrangant les deux inégalités précédentes on obtient :

$$J_\lambda(\beta^{k+1}) \leq J_\lambda(\beta^k) + \left(\frac{L}{2} - \frac{1}{t}\right)\|\beta^{k+1} - \beta^k\|^2$$