HAL open science

Screen & Relax: Accélérer la résolution du problème "Elastic-Net" par identification du support de la solution

Theo Guyard, Cédric Herzet, Clément Elvira

To cite this version:

Theo Guyard, Cédric Herzet, Clément Elvira. Screen & Relax: Accélérer la résolution du problème "Elastic-Net" par identification du support de la solution. GRETSI 2022 - XXVIIIème Colloque Francophone de Traitement du Signal et des Images, Sep 2022, Nancy, France. pp.1-4. hal-03778139

HAL Id: hal-03778139

https://hal.science/hal-03778139v1

Submitted on 15 Sep 2022

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Screen & Relax: Accélérer la résolution du problème "Elastic-Net" par identification du support de la solution

Théo GUYARD[1], Cédric HERZET[2], Clément ELVIRA[3]

[1]Univ Rennes, INSA Rennes, CNRS, IRMAR-UMR 6625, F-35000 Rennes, France

[2]INRIA Rennes-Bretagne Atlantique, Campus de Beaulieu, 35000 Rennes, France

[3]IETR UMR CNRS 6164, CentraleSupélec Rennes Campus, 35576 Cesson Sévigné, France

prénom.nom@{insa-rennes,inria,centralesupelec}.fr

Résumé – Dans cet article, nous proposons une procédure pour accélérer la résolution du problème "*Elastic-Net*". Notre méthode est basée sur l'identification partielle du support de la solution, permettant une reformulation du problème original en un problème de dimension réduite. Cette identification s'appuie sur le concept de *"relaxing"* qui peut être considéré comme une approche duale de la méthodologie de *"screening"*.

Abstract – In this paper, we propose a procedure to accelerate the resolution of the well-known Elastic-Net problem. Our procedure is based on the partial identification of the solution support and the reformulation of the original problem as a problem of reduced dimension. The support identification leverages the novel concept of *"relaxing"* that can be viewed as a dual approach to the popular *"screening"* methodology.

1 Introduction

Le problème de décomposition parcimonieuse vise à trouver une approximation d'un vecteur $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ comme la combinaison linéaire des colonnes (ou *atomes*) d'un dictionnaire $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_n] \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Malheureusement, résoudre ce problème de manière optimale s'avère être une tâche combinatoire [1, Sec. 2.3]. Une stratégie pour contourner cette difficulté consiste à approcher cette décomposition idéale par la solution d'un problème de la forme

$$\mathbf{x}^\star \in \underset{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}{\arg\min}\ \tfrac{1}{2}\|\mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_2^2 + \Omega(\mathbf{x}) \tag{1}$$

où $\Omega\colon \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}_+$ est un régulariseur convexe induisant la parcimonie de la solution. Un choix standard de régulariseur est $\Omega(\mathbf{x}) = \lambda\|\mathbf{x}\|_1 + \frac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2$ avec $\lambda > 0$ et $\varepsilon > 0$. Dans ce cas, le problème (1) est appelé *"Elastic-Net"*. Il est utilisé dans de nombreux domaines applicatifs [2].

L'*Elastic-Net* est un problème convexe et de nombreuses méthodes permettent de le résoudre efficacement [3]. Dans cet article, nous nous intéressons plus particulièrement aux méthodes de *"screening"*, introduites par El Ghaoui *et al.* dans [4]. Elles permettent d'identifier les éléments *nuls* des minimiseurs d'un problème d'optimisation parcimonieux (par exemple l'*Elastic-Net*) à l'aide de tests peu coûteux. Connaître la position d'un élément nul de la solution permet de réduire la dimension du problème en éliminant l'atome correspondant dans le dictionnaire. Au cours de la dernière décennie, de nombreux auteurs ont identifié le *screening* comme une procédure simple permettant d'accélérer de manière significative la résolution de nombreux problèmes parcimonieux.

Dans cet article, nous introduisons une nouvelle approche, duale du *screening*, que nous avons appelée *"relaxing"* et que nous appliquons à l'*Elastic-Net*. Pour alléger notre document, nous nous concentrons sur une instance spécifique du problème (1), à savoir la version non-négative de l'*Elastic-Net*. Néanmoins, notre méthode se généralise au cas de l'*Elastic-Net* classique. Nous cherchons à identifier la position des coefficients *non-nuls* du minimiseur de ce problème. Nous montrons que, de manière similaire au *screening*, cette connaissance peut être utilisée pour réduire de la dimensionnalité du problème cible afin d'accélérer sa résolution. Nous utilisons la terminologie "*relaxing*" car la réduction de la dimensionnalité du problème résulte de la relaxation de certaines contraintes.

Notre document est organisé de la manière suivante. Le problème cible est défini dans la section 2. Les concepts de *screening* et de *relaxing* sont présentés dans les sections 3 et 4. Dans la section 5, nous combinons ces deux méthodologies dans une unique méthode de *"Screen & Relax"*. Nous évaluons numériquement les performances de notre méthode dans la section 6.

Notations. Les lettres majuscules (*e.g.*, $\mathbf{A}$) et minuscules (*e.g.*, $\mathbf{x}$) en gras représentent des matrices et des vecteurs. $\mathbf{0}_n$ et $\mathbf{1}_n$ représentent les vecteurs de dimension n composés uniquement de zéros et de uns. $\mathbf{I}$ représente la matrice identité. La i-ème composante de $\mathbf{x}$ est notée $\mathbf{x}(i)$. Les lettres calligraphiques (*e.g.*, $\mathcal{I}$) sont utilisées pour désigner des ensembles et la notation $\overline{\mathcal{I}}$ correspond à l'ensemble complémentaire de $\mathcal{I}$. Nous désignons par $\mathbf{x}_\mathcal{I}$ la restriction de $\mathbf{x}$ à ses éléments indexés par $\mathcal{I}$ et $\mathbf{A}_\mathcal{I}$ correspond à la restriction de $\mathbf{A}$ à ses colonnes indexées par $\mathcal{I}$. Enfin, pour toute matrice symétrique, réelle et définie positive $\mathbf{M}$, on note $\|\mathbf{x}\|_\mathbf{M}^2 \triangleq \mathbf{x}^\mathrm{T}\mathbf{M}\mathbf{x}$. Nous supposons également sans perte de généralité que les colonnes de $\mathbf{A}$ sont normalisées.

2 Problème cible

La version non-négative de l'*Elastic-Net* est donnée par :

$$\min_{\mathbf{x}\geq\mathbf{0}_n} \; P(\mathbf{x}) \triangleq \tfrac{1}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2^2 + \boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}\mathbf{x} + \tfrac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{x}\|_2^2 \qquad (2\text{-}\mathcal{P})$$

où $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}_+^n$ et $\varepsilon > 0$. Notons que la formulation standard de l'*Elastic-Net* peut être vue comme un cas particulier de (2-$\mathcal{P}$), voir *e.g.*, [5, Sec. 2]. Puisque $P(\cdot)$ est continue, coercive et fortement convexe, (2-$\mathcal{P}$) admet un unique minimiseur $\mathbf{x}^\star$. L'objectif de cet article est d'accélérer la résolution de (2-$\mathcal{P}$) en identifiant la position des coefficients nuls et non nuls de $\mathbf{x}^\star$. Notre stratégie s'appuie sur les conditions d'optimalité présentées ci-dessous.

Le problème dual associé à (2-$\mathcal{P}$) est

$$\max_{\mathbf{u}\in\mathbb{R}^m} D(\mathbf{u}) = \tfrac{1}{2}\mathbf{u}^T(\mathbf{u}-2\mathbf{y}) - \tfrac{1}{2\varepsilon}\|[\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}-\boldsymbol{\lambda}]_+\|_2^2 \qquad (3\text{-}\mathcal{D})$$

où $[\mathbf{x}]_+ \triangleq \max(\mathbf{0}_n, \mathbf{x})$ et le maximum s'applique composante par composante. La fonction objectif de (3-$\mathcal{D}$) est continue, coercive et fortement concave. Il existe donc un unique maximiseur $\mathbf{u}^\star$ du problème (3-$\mathcal{D}$). Par construction des fonctions $P(\cdot)$ et $D(\cdot)$, la propriété de dualité forte est vérifiée entre (2-$\mathcal{P}$) et (3-$\mathcal{D}$). De plus, un couple $(\mathbf{x}^\star, \mathbf{u}^\star)$ est solution de (2-$\mathcal{P}$)-(3-$\mathcal{D}$) si et seulement si

$$\mathbf{u}^\star = \mathbf{y} - \mathbf{A}\mathbf{x}^\star \qquad (4)$$

$$\mathbf{x}^\star = \varepsilon^{-1}[\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}^\star - \boldsymbol{\lambda}]_+. \qquad (5)$$

En particulier, en posant $\mathcal{J}^\star \triangleq \{\ell\colon \mathbf{x}^\star(\ell) > 0\}$, on obtient par les relations (4)-(5) que

$$\mathbf{x}^\star_{\mathcal{J}^\star} = (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}_{\mathcal{J}^\star}\mathbf{A}_{\mathcal{J}^\star} + \varepsilon\mathbf{I})^{-1}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}_{\mathcal{J}^\star}\mathbf{y} - \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{J}^\star}). \qquad (6)$$

3 Tests de *screening*

Le but du *screening* est d'identifier les composantes nulles de $\mathbf{x}^\star$ afin de transformer (2-$\mathcal{P}$) en un problème de dimension réduite, ce qui permet d'accélérer sa résolution. Soit

$$\mathcal{I} \subseteq \{\ell\colon \mathbf{x}^\star(\ell) = 0\} \qquad (7)$$

un sous-ensemble des composantes nulles de $\mathbf{x}^\star$, on peut alors ré-écrire (2-$\mathcal{P}$) de manière équivalente comme

$$\mathbf{x}^\star = \underset{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}{\arg\min}\; P(\mathbf{x}) \;\text{ s.t. } \begin{cases} \mathbf{x}_{\overline{\mathcal{I}}} & \geq \mathbf{0}_{n_r} \\ \mathbf{x}_{\mathcal{I}} & = \mathbf{0}_{n-n_r} \end{cases} \qquad (8)$$

où $n_r \triangleq \mathrm{card}(\overline{\mathcal{I}})$. De manière plus explicite, on a

$$\mathbf{x}^\star_{\overline{\mathcal{I}}} = \underset{\mathbf{x}_r\geq\mathbf{0}_{n_r}}{\arg\min}\; \tfrac{1}{2}\|\mathbf{y}-\mathbf{A}_r\mathbf{x}_r\|_2^2 + \boldsymbol{\lambda}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_r + \tfrac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{x}_r\|_2^2 \qquad (9a)$$

$$\mathbf{x}^\star_{\mathcal{I}} = \mathbf{0}_{n-n_r} \qquad (9b)$$

où $\mathbf{A}_r \triangleq \mathbf{A}_{\overline{\mathcal{I}}} \in \mathbb{R}^{m\times n_r}$ et $\boldsymbol{\lambda}_r \triangleq \boldsymbol{\lambda}_{\overline{\mathcal{I}}} \in \mathbb{R}^{n_r}$. Dans la formulation ci-dessus, on remarque que (9a) a la même structure que (2-$\mathcal{P}$) mais avec un domaine d'optimisation de dimension réduite (n_r au lieu de n). Par conséquent, si $n_r \ll n$, il est potentiellement beaucoup plus intéressant de résoudre (9a) au lieu de (2-$\mathcal{P}$), puis de compléter la solution avec des zéros sur les indices correspondant à $\mathcal{I}$.

Les tests de *screening* permettent d'identifier un sous-ensemble $\mathcal{I} \subseteq \{1,\ldots,n\}$ vérifiant (7). La construction de ces tests s'appuie généralement sur les conditions d'optimalité du problème considéré. Pour le problème que nous considérons, la condition (5) nous donne

$$\forall \ell \in \{1,\ldots,n\}:\; \mathbf{a}_\ell^{\mathrm{T}}\mathbf{u}^\star \leq \boldsymbol{\lambda}(\ell) \iff \mathbf{x}^\star(\ell) = 0. \qquad (10)$$

Le partie gauche de l'équivalence est donc une condition suffisante pour que $\mathbf{x}^\star(\ell)$ soit nul. Malheureusement, obtenir $\mathbf{u}^\star$ est généralement aussi difficile que de calculer $\mathbf{x}^\star$. On peut toutefois palier à ce problème en utilisant des régions dites *"safe"*, *i.e.*, des sous-ensembles du domaine dual qui sont garantis de contenir $\mathbf{u}^\star$. Par exemple, supposons que $\mathbf{u}^\star$ appartienne à la région sphérique

$$\mathbf{u}^\star \in \mathcal{S}(\mathbf{c}, r) \triangleq \{\mathbf{u}\in\mathbb{R}^m\colon \|\mathbf{u}-\mathbf{c}\|_2 \leq r\}. \qquad (11)$$

Le test (10) peut alors être relâché de la manière suivante :

$$\max_{\mathbf{u}\in\mathcal{S}(\mathbf{c},r)} \mathbf{a}_\ell^{\mathrm{T}}\mathbf{u} = \mathbf{a}_\ell^{\mathrm{T}}\mathbf{c} + r \leq \boldsymbol{\lambda}(\ell) \implies \mathbf{x}^\star(\ell) = 0. \qquad (12)$$

Beaucoup de méthodes de construction de régions *safe* ont été proposées dans la littérature ces dernières années, voir *e.g.*, [5].

4 Tests de *relaxing*

Nous présentons maintenant notre méthodologie de *"relaxing"*. Contrairement au *screening*, notre objectif est d'identifier les positions des coefficients *non-nuls* de $\mathbf{x}^\star$. Notre but final reste néanmoins le même que celui du screening, à savoir la réduction de (2-$\mathcal{P}$) en un problème de dimension réduite. Soit

$$\mathcal{J} \subseteq \{\ell\colon \mathbf{x}^\star(\ell) > 0\} \qquad (13)$$

un sous-ensemble de coefficients non-nuls de $\mathbf{x}^\star$, (2-$\mathcal{P}$) peut alors être exprimé de manière équivalente comme

$$\mathbf{x}^\star = \underset{\mathbf{x}\in\mathbb{R}^n}{\arg\min}\; P(\mathbf{x}) \;\text{ s.t. } \begin{cases} \mathbf{x}_{\overline{\mathcal{J}}} & \geq \mathbf{0}_{n_r} \\ \mathbf{x}_{\mathcal{J}} & \in \mathbb{R}^{n-n_r} \end{cases} \qquad (14)$$

où $n_r \triangleq \mathrm{card}(\overline{\mathcal{J}})$. Dans le problème ci-dessus, les contraintes sur les éléments de $\mathcal{J}$ ont été totalement supprimées car elles ne sont pas actives à l'optimum. Comme pour le *screening*, cette relaxation permet d'exprimer (2-$\mathcal{P}$) comme un problème de dimension réduite.

Premièrement, remarquons que (14) peut être ré-écrit comme :

$$\mathbf{x}^\star_{\overline{\mathcal{J}}} = \underset{\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{J}}}\geq\mathbf{0}_{n_r}}{\arg\min}\left(\min_{\mathbf{x}_{\mathcal{J}}\in\mathbb{R}^{n-n_r}} P(\mathbf{x})\right). \qquad (15)$$

Puisque la minimisation intérieure dans (15) est un problème quadratique fortement convexe, il admet l'unique minimiseur

$$\mathbf{x}_{\mathcal{J}} = \mathbf{B}\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{J}}} + \mathbf{b} \qquad (16)$$

où $\mathbf{B}$ et $\mathbf{b}$ sont définis par

$$\mathbf{B} \triangleq -(\mathbf{A}_{\mathcal{J}}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_{\mathcal{J}} + \varepsilon\mathbf{I})^{-1}\mathbf{A}_{\mathcal{J}}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_{\overline{\mathcal{J}}} \qquad (17a)$$

$$\mathbf{b} \triangleq -(\mathbf{A}_{\mathcal{J}}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}_{\mathcal{J}} + \varepsilon\mathbf{I})^{-1}\big(\mathbf{A}_{\mathcal{J}}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} - \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{J}}\big). \qquad (17b)$$

Algorithme 1 : Algorithme "Screen & Relax"

Entrée : $\mathbf{x}^{(0)}$, $\mathbf{A}$, $\mathbf{y}$, $\boldsymbol{\lambda}$, ε

1 $t \leftarrow 1$
2 $(\mathcal{I}, \mathcal{J}, \mathcal{K}) \leftarrow (\emptyset, \emptyset, \emptyset)$
3 $(\mathbf{A}_r, \boldsymbol{\lambda}_r, \mathbf{y}_r, \mathbf{M}) \leftarrow (\mathbf{A}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{I})$
4 **tant que** *la convergence n'est pas atteinte* **faire**
5 $\quad \mathbf{x}_{\overline{\mathcal{K}}}^{(t)} \leftarrow$ Itération($\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{K}}}^{(t-1)}, \mathbf{A}_r, \mathbf{y}_r, \boldsymbol{\lambda}_r, \mathbf{M}, \varepsilon$)
6 $\quad$ Calculer une nouvelle région *safe* $\mathcal{S}(\mathbf{c}^{(t)}, r^{(t)})$
7 $\quad$ Mettre à jour $\mathcal{I}$ avec le test (12)
8 $\quad$ Mettre à jour $\mathcal{J}$ avec le test (21)
9 $\quad \mathcal{K} \leftarrow \mathcal{I} \cup \mathcal{J}$
10 $\quad$ Mettre à jour $\mathbf{A}_r, \mathbf{y}_r, \boldsymbol{\lambda}_r, \mathbf{M}$ si besoin avec (19)
11 $\quad t \leftarrow t + 1$
12 **fin**

Injecter (16) dans la fonction de coût $P(\cdot)$ conduit alors à la formulation équivalente de (2-$\mathcal{P}$) suivante :

$$\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{J}}}^{\star} = \underset{\mathbf{x}_r \geq \mathbf{0}_{n_r}}{\arg\min} \tfrac{1}{2}\|\mathbf{y}_r - \mathbf{A}_r\mathbf{x}_r\|_2^2 + \boldsymbol{\lambda}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_r + \tfrac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{x}_r\|_{\mathbf{M}}^2 \quad (18a)$$

$$\mathbf{x}_{\mathcal{J}}^{\star} = \mathbf{B}\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{J}}}^{\star} + \mathbf{b} \quad (18b)$$

avec

$$\mathbf{A}_r \triangleq \mathbf{A}_{\overline{\mathcal{J}}} + \mathbf{A}_{\mathcal{J}}\mathbf{B} \quad (19a)$$

$$\boldsymbol{\lambda}_r \triangleq \boldsymbol{\lambda}_{\overline{\mathcal{J}}} + \mathbf{B}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{J}} + \varepsilon\mathbf{b}) \quad (19b)$$

$$\mathbf{y}_r \triangleq \mathbf{y} - \mathbf{A}_{\mathcal{J}}\mathbf{b} \quad (19c)$$

$$\mathbf{M} \triangleq \mathbf{I} + \mathbf{B}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}. \quad (19d)$$

À l'instar du *screening*, le problème réduit (18a) conserve la structure de (2-$\mathcal{P}$). Les paramètres $\mathbf{A}_r$, $\boldsymbol{\lambda}_r$, $\mathbf{y}_r$ et $\mathbf{M}$ diffèrent cependant de ceux définis dans (9a). Alors que la construction de $\mathbf{A}_r$ nécessite seulement de supprimer certaines colonnes de $\mathbf{A}$ dans (9a), elle implique une inversion de matrice dans (18a). Cette opération peut être relativement coûteuse à effectuer et on doit donc y porter une attention particulière, comme expliqué dans la section 6.

L'identification d'un ensemble $\mathcal{J}$ vérifiant (13) s'appuie également sur la condition d'optimalité (5). En effet, on a

$$\forall \ell \in \{1, \ldots, n\} : \ \mathbf{a}_\ell^{\mathrm{T}}\mathbf{u}^\star > \boldsymbol{\lambda}(\ell) \iff \mathbf{x}^\star(\ell) > 0. \quad (20)$$

De la même manière que pour le *screening*, on peut utiliser une région *safe* comme (11) pour obtenir une version plus faible, mais utile, de (20). Cela conduit au test de *relaxing* suivant :

$$\min_{\mathbf{u} \in \mathcal{S}(\mathbf{c}, r)} \mathbf{a}_\ell^{\mathrm{T}}\mathbf{u} = \mathbf{a}_\ell^{\mathrm{T}}\mathbf{c} - r > \boldsymbol{\lambda}(\ell) \implies \mathbf{x}^\star(\ell) > 0. \quad (21)$$

5 Screen & Relax

Les tests de "*screening*" et de "*relaxing*" décrits dans les sections 3 et 4 peuvent être combinés dans une stratégie de *"Screen & Relax"* afin de bénéficier simulatanément de l'identification des composantes nulles et non nulles de $\mathbf{x}^\star$. Soit $\mathcal{I}$ et $\mathcal{J}$ des sous-ensembles d'indices vérifiant (7) et (13) et soit $\mathcal{K} \triangleq (\mathcal{I} \cup \mathcal{J})$ l'ensemble des composantes de $\mathbf{x}^\star$ déjà identifiées comme nulles ou non nulles. En appliquant le même raisonnement que dans les sections 3 et 4, on obtient la formulation équivalente de (2-$\mathcal{P}$) suivante :

$$\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{K}}}^{\star} = \underset{\mathbf{x}_r \geq \mathbf{0}_{n_r}}{\arg\min} \tfrac{1}{2}\|\mathbf{y}_r - \mathbf{A}_r\mathbf{x}_r\|_2^2 + \boldsymbol{\lambda}_r^{\mathrm{T}}\mathbf{x}_r + \tfrac{\varepsilon}{2}\|\mathbf{x}_r\|_{\mathbf{M}}^2 \quad (22a)$$

$$\mathbf{x}_{\mathcal{J}}^{\star} = \mathbf{B}\mathbf{x}_{\overline{\mathcal{K}}}^{\star} + \mathbf{b} \quad (22b)$$

$$\mathbf{x}_{\mathcal{I}}^{\star} = \mathbf{0}_{\mathrm{card}(\mathcal{I})}, \quad (22c)$$

où les paramètres $\mathbf{A}_r$, $\boldsymbol{\lambda}_r$, $\mathbf{y}_r$ et $\mathbf{M}$ sont définis par les relations (17) et (19) en utilisant $\overline{\mathcal{K}}$ au lieu de $\overline{\mathcal{J}}$. La dimension du problème réduit (22a) est alors $n_r = \mathrm{card}(\overline{\mathcal{K}})$.

Lorsque l'égalité survient dans (7) et (13) (c'est à dire toutes les composantes nulles et non-nulles de $\mathbf{x}^\star$ ont été identifiées), les relations (22b)-(22c) caractérisent entièrement la solution de (2-$\mathcal{P}$). Dans ce cas, (22b) est équivalent à (6). La solution de (2-$\mathcal{P}$) peut donc être calculée à *précision machine* via de simples opérations d'algèbre linéaire.

6 Résultats numériques

Dans cette dernière section, nous évaluons le gain de calcul permis par la méthode proposée dans cet article. L'objectif est purement méthodologique et consiste à résoudre (2-$\mathcal{P}$) le plus précisément possible avec un certain budget calculatoire. On considère $\boldsymbol{\lambda} = \lambda\mathbf{1}_n$ et $0 < \lambda < \lambda_{\max} \triangleq \max(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{y})$ (rappelons que $\mathbf{x}^\star = \mathbf{0}_n$ dès lors que $\lambda \geq \lambda_{\max}$).

Nous considérons la procédure "Screen & Relax" (S&R) décrite dans l'Algorithme 1. La fonction "Itération" dans la ligne 5 correspond à une itération d'un algorithme de gradient proximal (accéléré) [3] appliqué au problème (22a). La construction de la région *safe* pour effectuer les tests de *screening* et de *relaxing* est effectuée selon la méthodologie "GAP" présentée dans [6, Th. 6]. Le problème (22a) est mis à jour à chaque nouvelle identification de composants nuls ou non nuls de $\mathbf{x}^\star$. Comme l'ensemble $\mathcal{J}$ ne varie généralement que de quelques éléments à chaque itération de l'Algorithme 1, on peut calculer efficacement la matrice inverse dans (17a)-(17b) à l'aide de règles de mise à jour de rang un [7].

Nous comparons les performances du S&R avec trois versions restreintes de l'Algorithme 1 : *i)* ni le *screening* ni le *relaxing* ne sont effectués ; *ii)* seul le *screening* est effectué ; *iii)* seul le *relaxing* est effectué. Ces variantes seront respectivement désignées par "aPG", "aPGs" et "aPGr". Les algorithmes aPG et aPGs correspondent à des méthodologies standard tandis que aPGr et S&R sont des contributions de cet article.

Nous utilisons les courbes de "Dolan-Moré" [8] pour évaluer les performances de ces quatre méthodes dans la Figure 1. Pour générer chaque courbe, nous exécutons une méthode de résolution avec un budget de calcul *fixé* sur 100 instances différentes du problème (2-$\mathcal{P}$). La courbe résultante correspond au pourcentage $\rho(\tau)$ d'instances du problème pour lesquelles la méthode de résolution atteint un gap de dualité inférieur à τ.

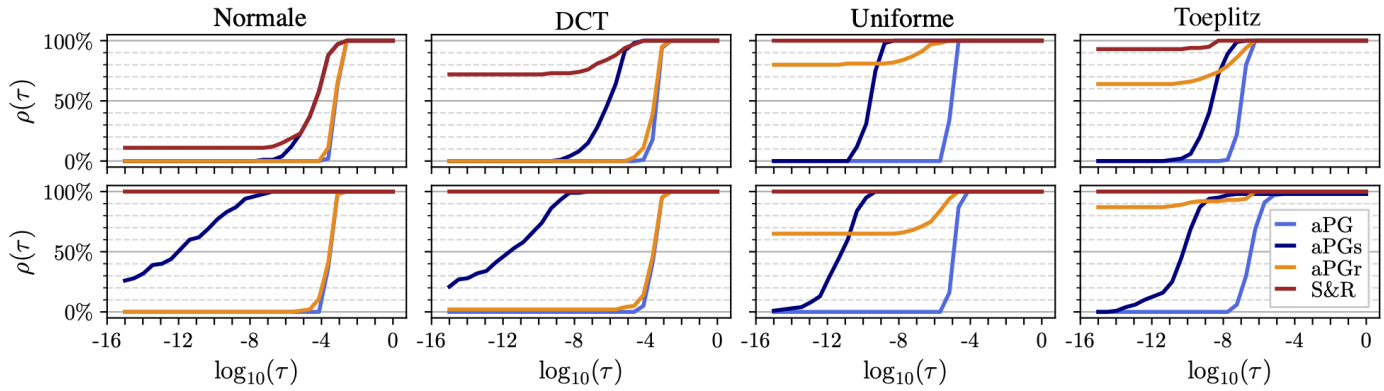

FIGURE 1 – Profils de performance de Dolan-Moré. Haut : $(\lambda, \varepsilon) = (0.2, 0.5)\lambda_{\max}$. Bas : $(\lambda, \varepsilon) = (0.5, 0.2)\lambda_{\max}$.

Pour générer les données du problème, nous considérons les quatre configurations suivantes : les éléments de $\mathbf{A}$ sont des réalisations i.i.d. de *i)* une distribution normale ou *ii)* une loi uniforme sur $[0, 1]$; *iii)* les lignes de $\mathbf{A}$ sont échantillonnées de manière aléatoire à partir d'une matrice DCT ; *iv)* $\mathbf{A}$ a une structure Tœplitz avec des versions décalées d'un sinus cardinal échantillonné. Dans toutes les configurations, les colonnes de $\mathbf{A}$ sont normalisées à un. Le vecteur $\mathbf{y}$ est tiré sur la sphère unité m-dimensionnelle pour les dictionnaires "Normale" et "DCT" et il est restreint à l'orthant positif pour les dictionnaires "Uniforme" et "Tœplitz". Nous fixons $m = 100$, $n = 300$ ainsi que $(\lambda, \varepsilon) = (0, 2, 0, 5) \times \lambda_{\max}$ ou $(\lambda, \varepsilon) = (0, 5, 0, 2) \times \lambda_{\max}$. Chaque instance de problème est résolue avec un budget de 2×10^6 FLOPs (nombre d'opérations) pour les dictionnaires "Normale" et "DCT" et 2×10^7 FLOPs pour les dictionnaires "Uniforme" et "Tœplitz". La différence entre les budgets de calcul provient du mauvais conditionnement des dictionnaires "Uniform" et "Tœplitz" qui conduit à une convergence plus lente des méthodes numériques.

On remarque que le *relaxing* seul (aPGr) s'avère particulièrement intéressant pour les dictionnaires avec des atomes fortement corrélés (*e.g.*, "Uniforme" ou "Tœplitz"). Une étude approfondie de nos résultats de simulation nous a permis de conclure que ce comportement est dû à une amélioration du conditionnement du problème lors du passage de (2-$\mathcal{P}$) à (22a) et donc du taux de convergence de l'algorithme de gradient proximal. La méthode combinant le *screening* et le *relaxing* est la plus performante des quatre méthodes comparées. On remarque que le S&R atteint la précision machine ($\tau = 10^{-16}$) pour une grande partie des instances du problème et dans la plupart des configurations. Cela s'explique par le comportement mis en évidence en fin de section 5 : lorsque tous les éléments nuls et non nuls de $\mathbf{x}^\star$ sont identifiés, le minimiseur peut être explicitement calculé via (18b) avec de simples opérations linéaires. L'identification complète des éléments nuls et non nuls de $\mathbf{x}^\star$ se produit toujours après un nombre fini d'itérations lorsque la méthodologie "GAP" est utilisée pour construire la sphère *safe* dans les tests (12) et (21).

7 Conclusion

Dans cet article, nous avons proposé une nouvelle méthodologie dite de "*relaxing*" pour détecter et exploiter la connaissance de positions de composantes non-nulles dans la solution d'*Elastic-Net*. À l'instar des techniques de "*screening*", la méthode proposée permet de réduire les dimensions du problème d'optimisation considéré. Nous montrons numériquement que la combinaison d'approches de "*screening*" et de "*relaxing*" permet des améliorations substantielles de la précision pour un coût calculatoire donné. Nous notons toutefois que notre méthode ne s'applique que lorsque l'extraction de colonnes du dictionnaire est possible, ce qui n'est pas toujours naturel pour des dictionnaires basés sur des transformées rapides.

Références

[1] S. FOUCART et H. RAUHUT. *A Mathematical Introduction to Compressive Sensing*. Springer New York, 2013.

[2] H. ZOU et T. HASTIE. « Regularization and variable selection via the elastic net ». *Journal of the Royal Statistical Society : Series B* 67.2 (2005), p. 301-320.

[3] N. PARIKH et S. BOYD. « Proximal algorithms ». *Foundations and Trends in optimization* 1.3 (2014), p. 127-239.

[4] L. El GHAOUI et al. « Safe feature elimination for the lasso and sparse supervised learning problems ». *Pacific Journal of Optimization* 8.4 (2010), p. 667-698.

[5] Z. XIANG et al. « Screening tests for lasso problems ». *IEEE transactions on pattern analysis and machine intelligence* 39.5 (2016), p. 1008-1027.

[6] E. NDIAYE et al. « Gap safe screening rules for sparse-group lasso ». *Advances in neural information processing systems* 29 (2016), p. 388-396.

[7] W. HAGER. « Updating the inverse of a matrix ». *SIAM review* 31.2 (1989), p. 221-239.

[8] E. DOLAN et J. MORÉ. « Benchmarking optimization software with performance profiles ». *Mathematical programming* 91.2 (2002), p. 201-213.