大阪市立大学電子・物理工学特別講義

今日からできる
スパースモデリング

京都大学大学院情報学研究科システム科学専攻
大関　真之

QUANTUM ANNEALING
MACHINE LEARNING
Sparse Modeling

第一部：圧縮センシング

中学生の頃の思い出

中学生の頃の思い出

連立方程式

$$2x_1 + x_2 = 1$$

を満たす解を求めよ

$$2x_1 + x_2 = 1$$

を満たす解を求めよ

（一意には）できません

$$2x_1 + x_2 = 1$$

を満たす解を求めよ

（一意には）できません

式が足りないから

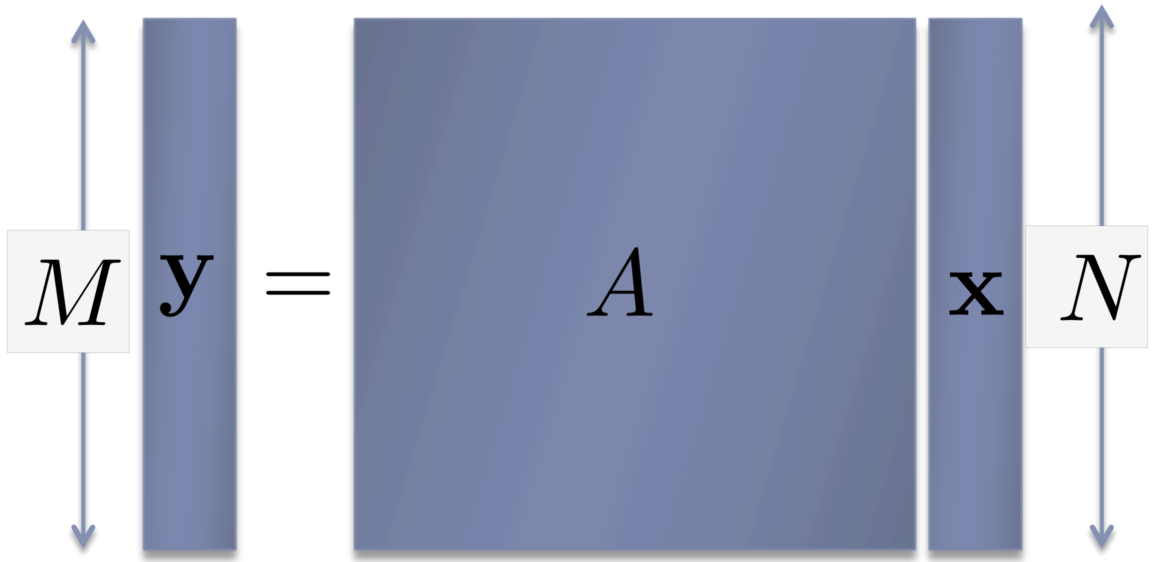
$$2x_1 + x_2 = 1$$

を満たす解を求めよ

（一意には）できません

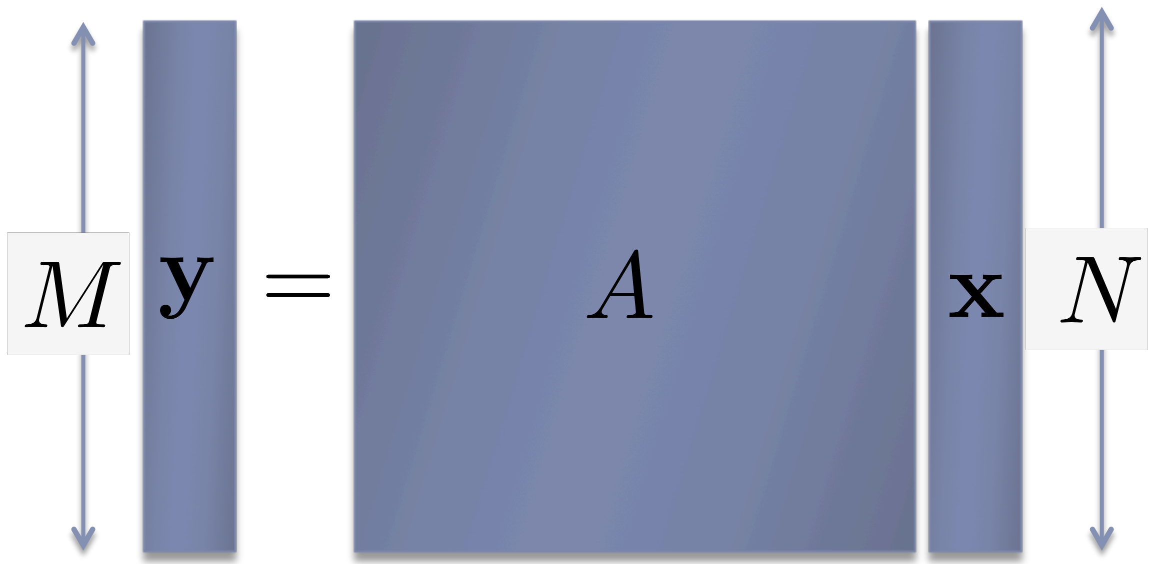
式が足りないから

情報が足りないから



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

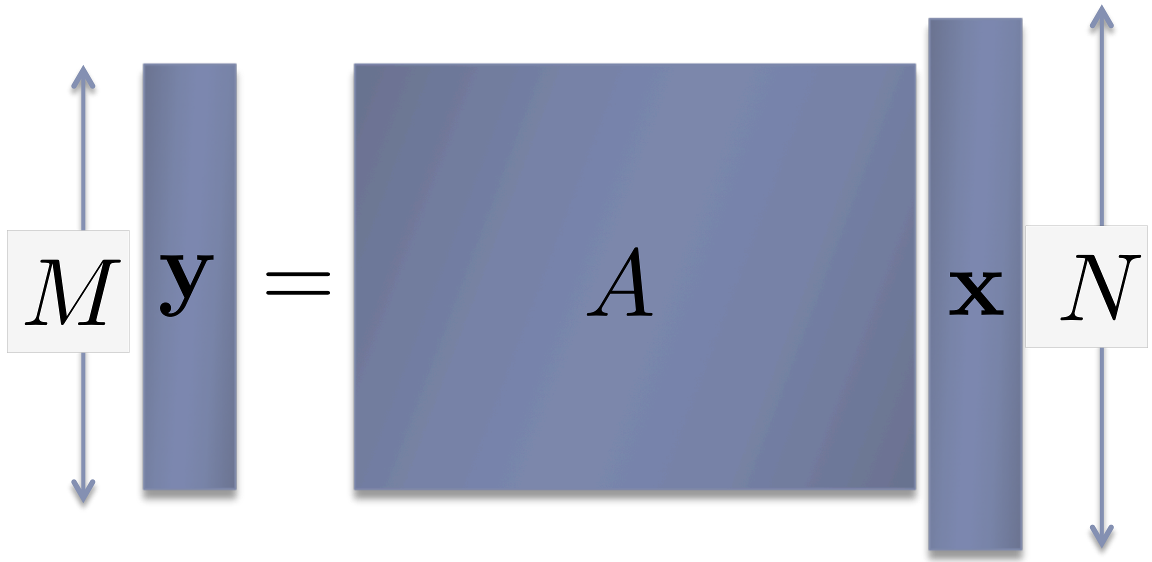
を満たす解を求めよ



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

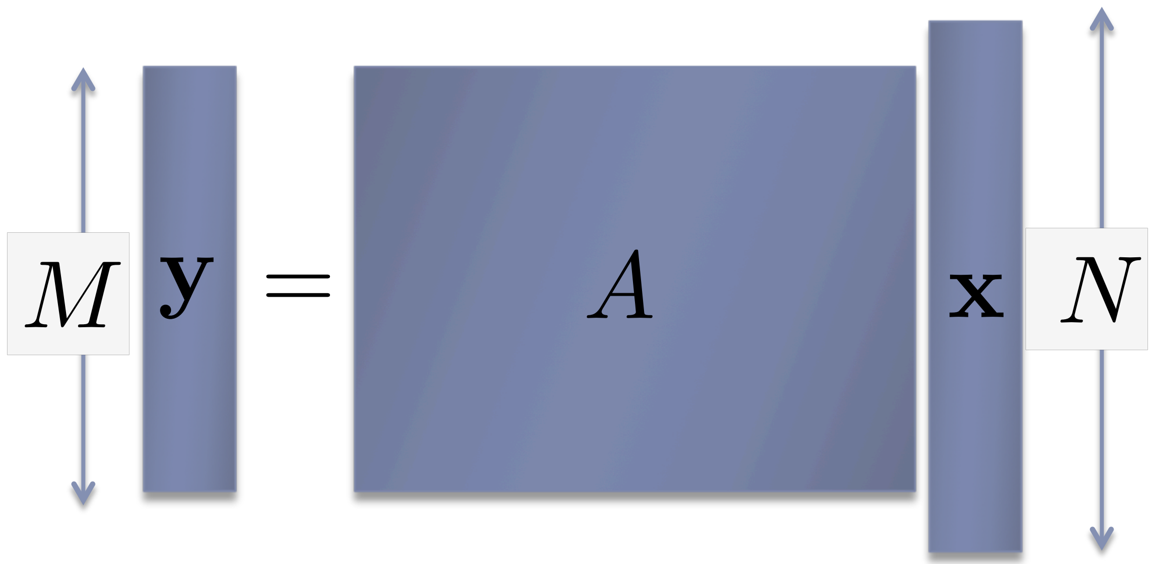
を満たす解を求めよ

逆行列があるからOK



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

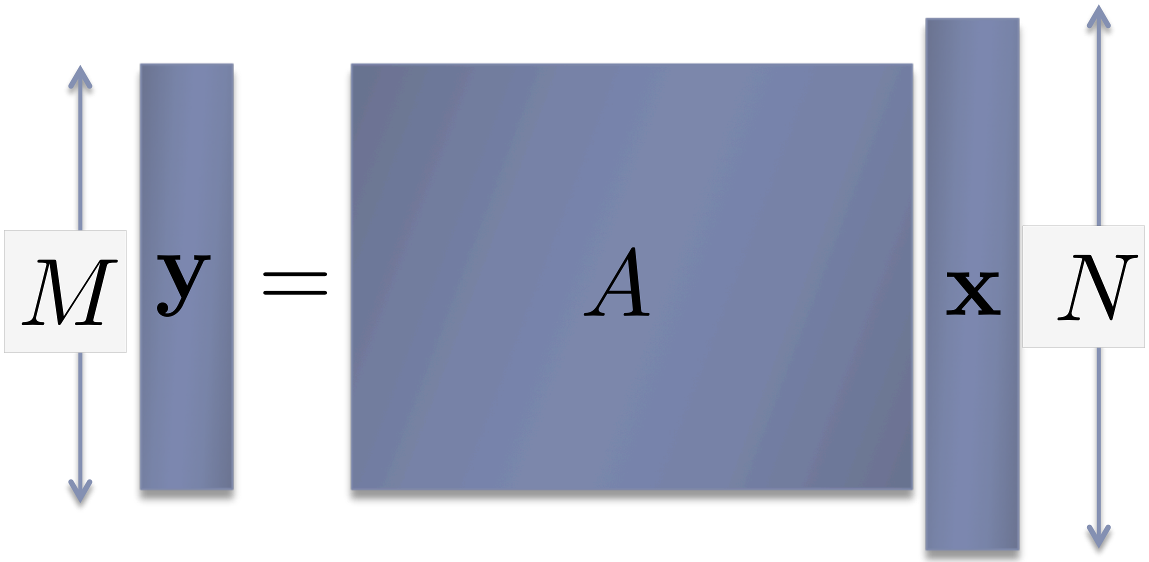
を満たす解を求めよ



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

を満たす解を求めよ

（一意には）できません



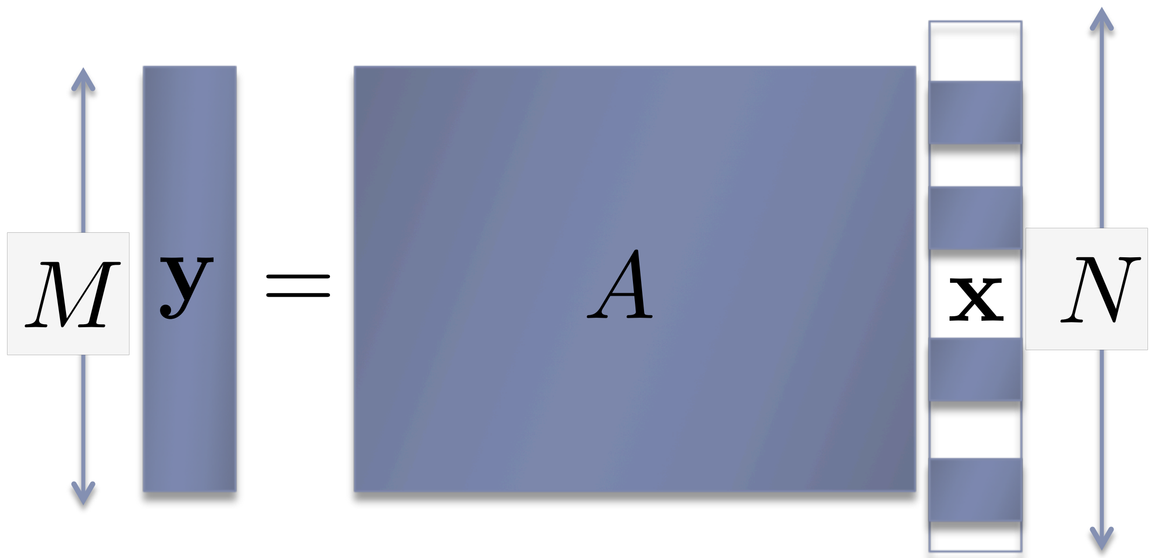
$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

を満たす解を求めよ

（一意には）できません

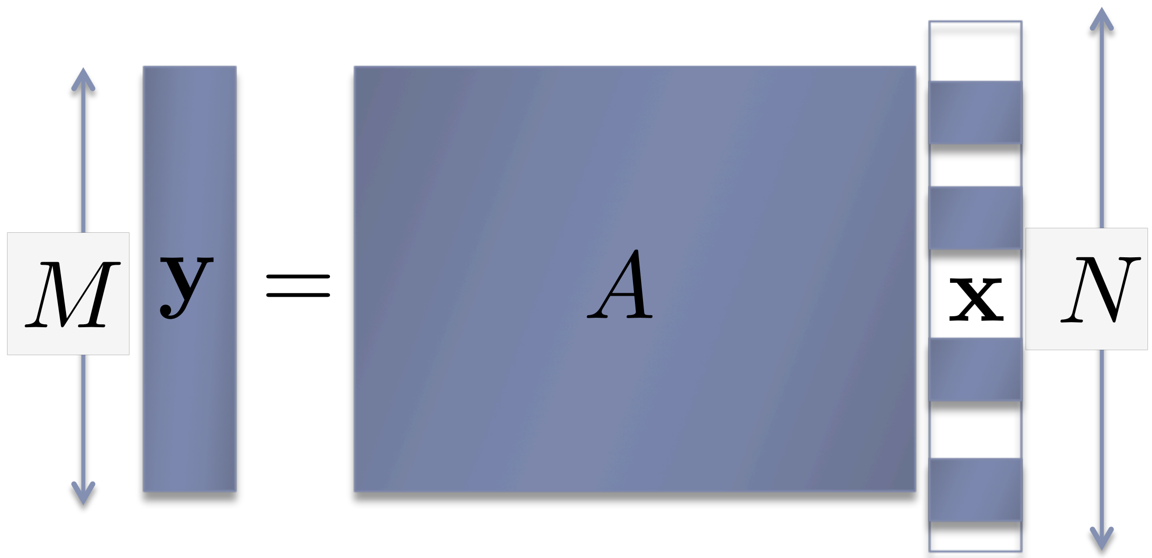
劣決定系

スパース性があるときは？



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

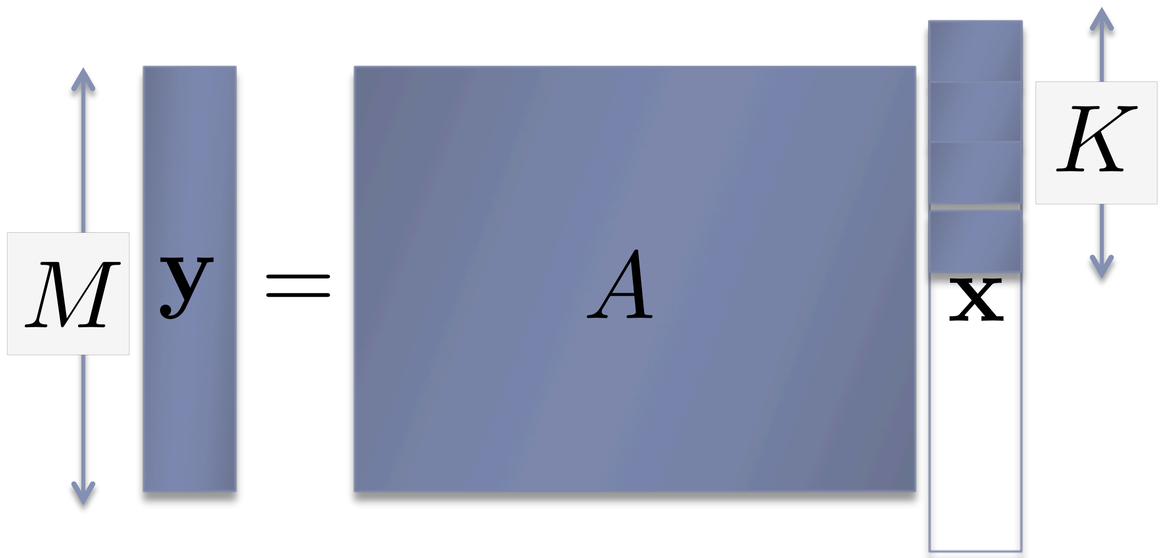
を満たす解を求めよ



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

を満たす解を求めよ

できる！



$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

を満たす解を求めよ

できる！

スパース解推定

- L0ノルム最小化によるスパース解推定
  - 以下の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

- 非零成分の個数が小さい（スパース）で方程式を満たすものを探す

スパース解推定

- L0ノルム最小化によるスパース解推定
  - 以下の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

- 非零成分の個数が小さい（スパース）で方程式を満たすものを探す
- 残念ながら計算量的に困難

スパース解推定

- L0ノルム最小化によるスパース解推定
  - 以下の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

    - 非零成分の個数が小さい（スパース）で方程式を満たすものを探す
    - 残念ながら計算量的に困難
- L1ノルム最小化によるスパース解推定
  - 代わりに次の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

- L0ノルム最小化によるスパース解推定
  - 以下の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

    - 非零成分の個数が小さい（スパース）で方程式を満たすものを探す
    - 残念ながら計算量的に困難
- L1ノルム最小化によるスパース解推定
  - 代わりに次の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

    - 零が多ければ小さくなる＋大きさも小さくなりがち
    - 計算量は非常に軽い（Nの3乗程度）

ノルムについて注意

- Lpノルムの定義

$$\|\mathbf{x}\|_p = \sqrt[p]{|x_1|^p + |x_2|^p + \cdots + |x_N|^p}$$

- L0「ノルム」はちょっと変
  - p->0の極限で定義.
- L1ノルムは絶対値の和

$$\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + |x_2| + \cdots + |x_N|$$

- L2ノルムはユークリッド距離

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + \cdots + x_N^2}$$

スパース解推定?

- L2ノルム最小化によるスパース解推定は？
  - 以下の最小化問題でスパース解を探索しよう！

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_2 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

  - 零が多ければ小さい＋大きさがかなり小さくなりがち+小さいかすが残る
  - 計算量は非常に軽い（Nの2〜3乗程度）

QUANTUM ANNEALING
MACHINE LEARNING
Sparse Modeling

例題CS-I

以下のふたつの最小化問題を解いてみよう．

$$\min_{x_1,x_2}\{|x_1|+|x_2|\}\quad \text{s.t.}\quad y=A\mathbf{x}$$

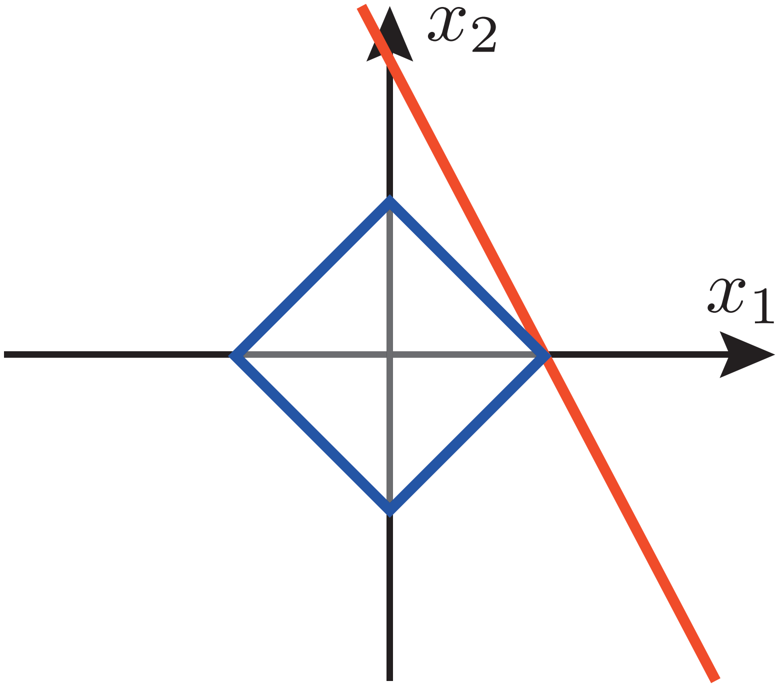
$$\min_{x_1,x_2}\left\{\sqrt{x_1^2+x_2^2}\right\}\quad \text{s.t.}\quad y=A\mathbf{x}$$

ここで観測行列 A は、単なる行ベクトルに過ぎず、

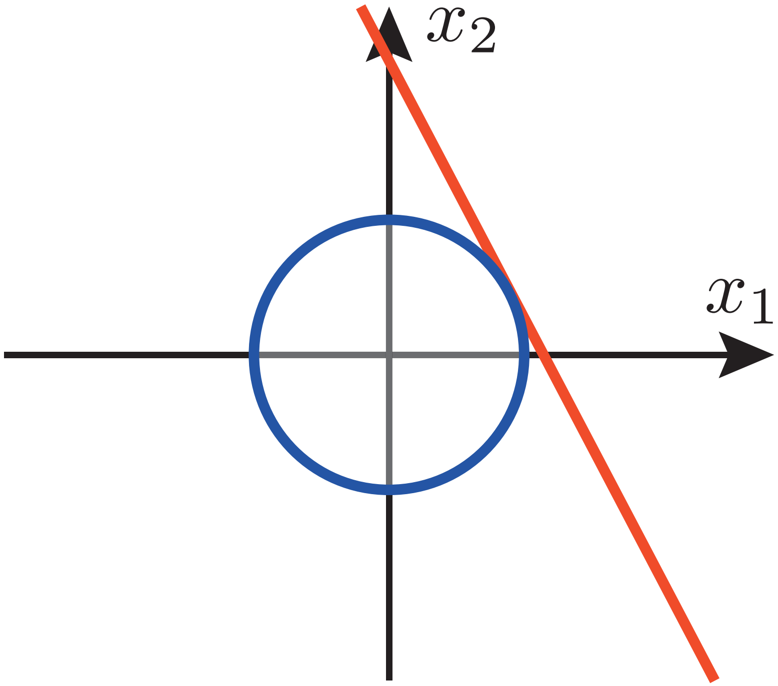
$$A=\begin{pmatrix} 2 & 1 \end{pmatrix}$$

とする．$y=1$ とする．

正解

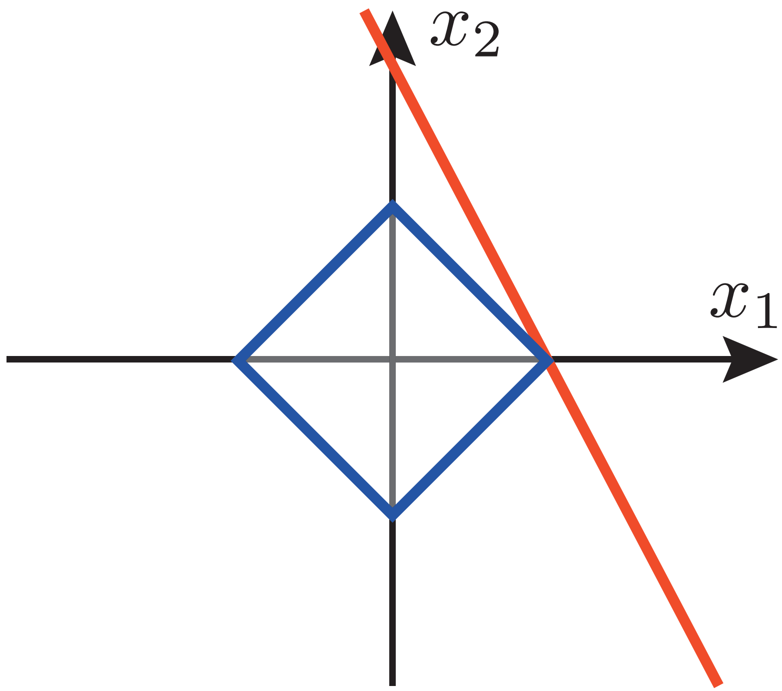


$$(x_1, x_2) = (1/2, 0)$$



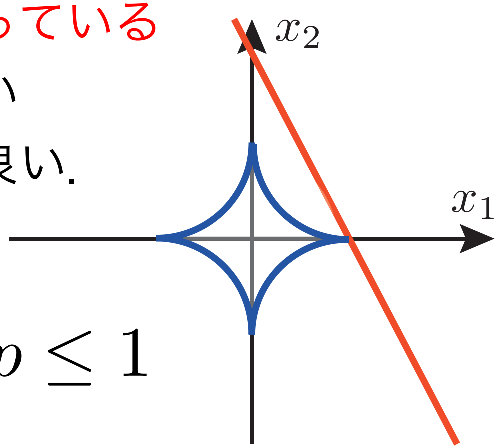
$$(x_1, x_2) = (2/5, 1/5)$$

吟味と注意

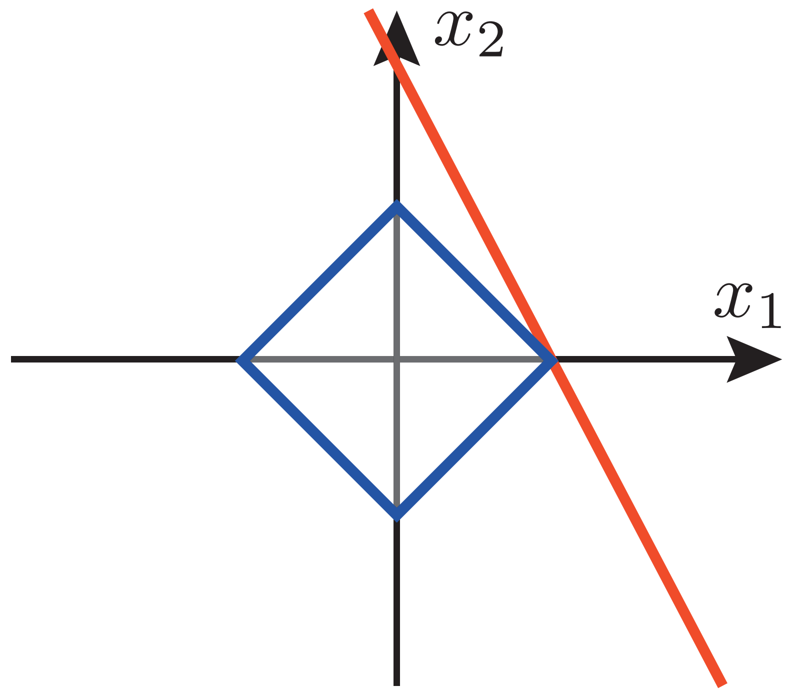


- L1ノルム最小化で
  スパース解は確かに得られる.
  - L1ノルムは尖っている
  - L2ノルムは丸い
  - Lpノルムでも良い.

$$0 < p \leq 1$$

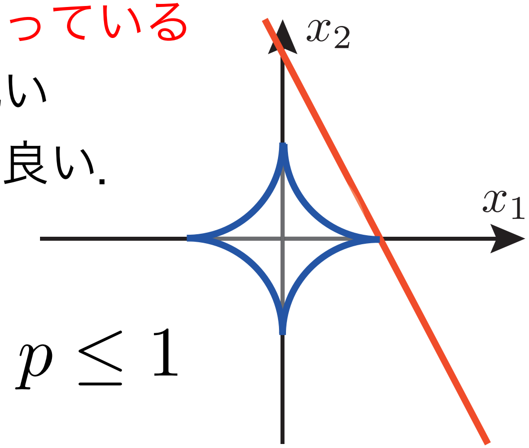


吟味と注意



- L1ノルム最小化で
  スパース解は確かに得られる.
  - L1ノルムは尖っている
  - L2ノルムは丸い
  - Lpノルムでも良い.

$$0 < p \leq 1$$



- L2ノルム最小化でも劣決定系の
  方程式の解が得られる.
  - ノルム最小化による解選択
    - L1ノルムはスパース解
    - L2ノルムは大きさが小さい解

基底追跡

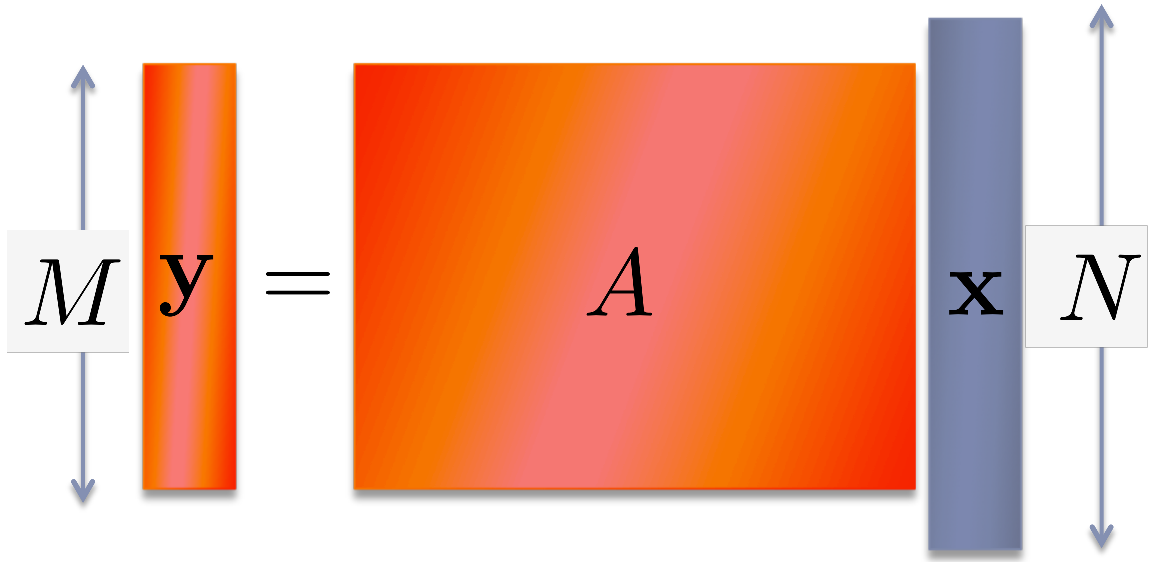
- L1ノルム最小化によるスパース解推定法
  - 基底追跡（Basis Pursuit）

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

    - L1ノルムは零が多ければ小さくなる＋大きさも小さくなりがち
    - 計算量は非常に軽い（Nの3乗程度）

注意

圧縮センシング＝L1ノルム最小化ではない



足りない観測情報

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

の結果から推定せよ

例題CS-II

スパースな原信号ベクトル $\mathbf{x}_0^{\mathrm{T}} = (1/2, 0)$ に対して、$A = (2, 1)$ を作用して得られる $y = A\mathbf{x}_0 = 1$ のみが得られているとする．基底追跡により、スパース解を選択することにより原信号ベクトルを推定せよ．

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

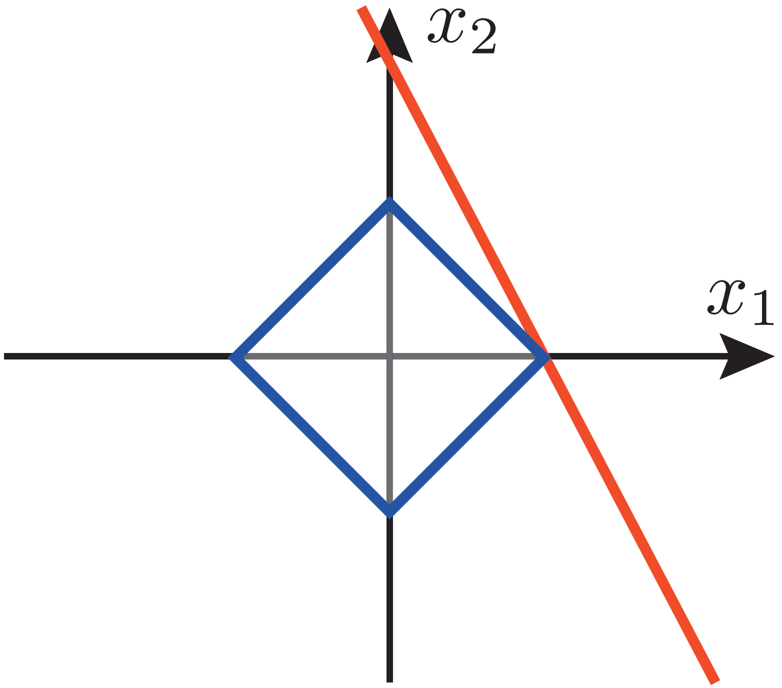
Sparse Modeling

例題CS-II

スパースな原信号ベクトル $\mathbf{x}_0^{\mathrm{T}} = (1/2, 0)$ に対して、$A = (2, 1)$ を作用して得られる $y = A\mathbf{x}_0 = 1$ のみが得られているとする．基底追跡により、スパース解を選択することにより原信号ベクトルを推定せよ．

- 正解はもちろん

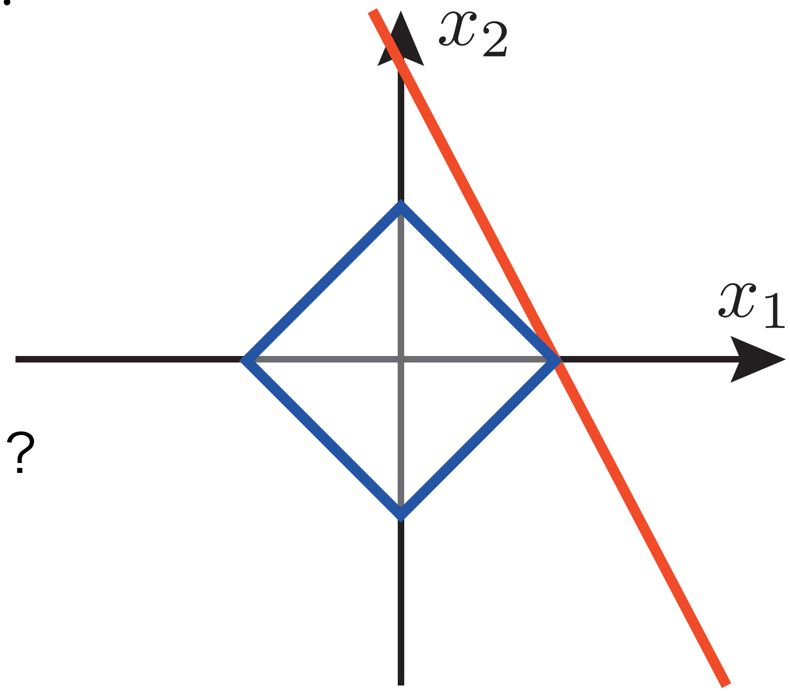
$$(x_1, x_2) = (1/2, 0)$$



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING Sparse Modeling

例題CS-II

スパースな原信号ベクトル $\mathbf{x}_0^{\mathrm{T}} = (1/2, 0)$ に対して、$A = (2, 1)$ を作用して得られる $y = A\mathbf{x}_0 = 1$ のみが得られているとする．基底追跡により、スパース解を選択することにより原信号ベクトルを推定せよ．



- 正解はもちろん

$$(x_1, x_2) = (1/2, 0)$$

- では原信号ベクトルが(0,1)だったら？？
  - 外れている….

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING Sparse Modeling

基底追跡の性能

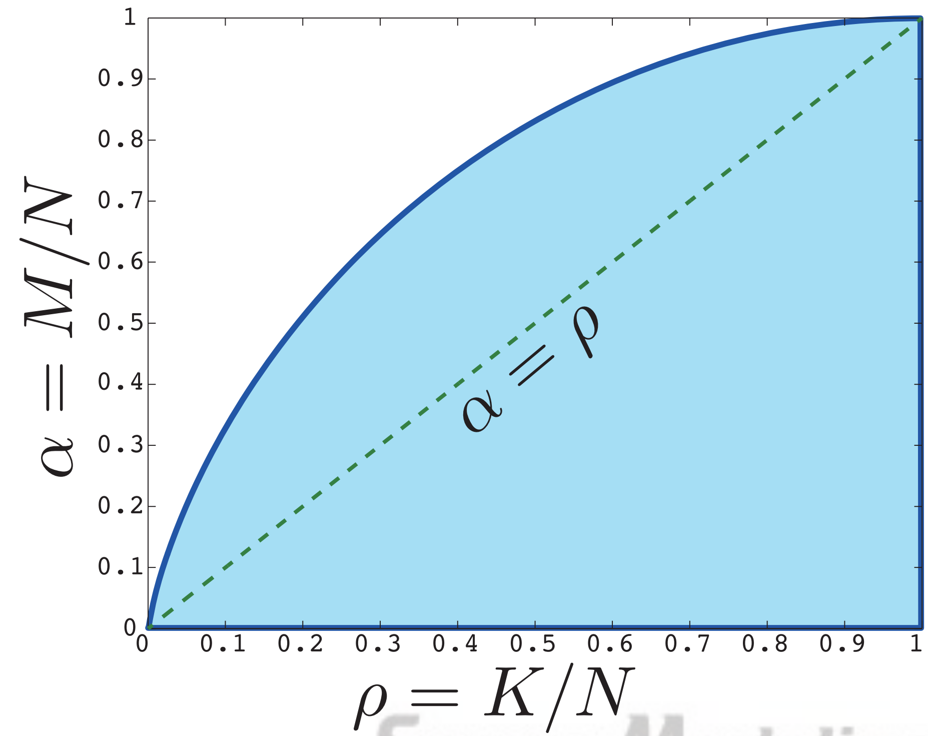
- L1ノルム最小化によるスパース解推定法
  - 基底追跡（Basis Pursuit）

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{s.t.} \quad \mathbf{y} = A\mathbf{x}$$

$$\frac{1}{\alpha} = 1 + \sqrt{\frac{\pi}{2}} t \mathrm{e}^{\frac{t^2}{2}} \left\{1 - 2Q(t)\right\}$$

$$\frac{\rho}{1-\rho} = 2\left(\frac{\mathrm{e}^{\frac{t^2}{2}}}{t\sqrt{2\pi}} - Q(t)\right)$$

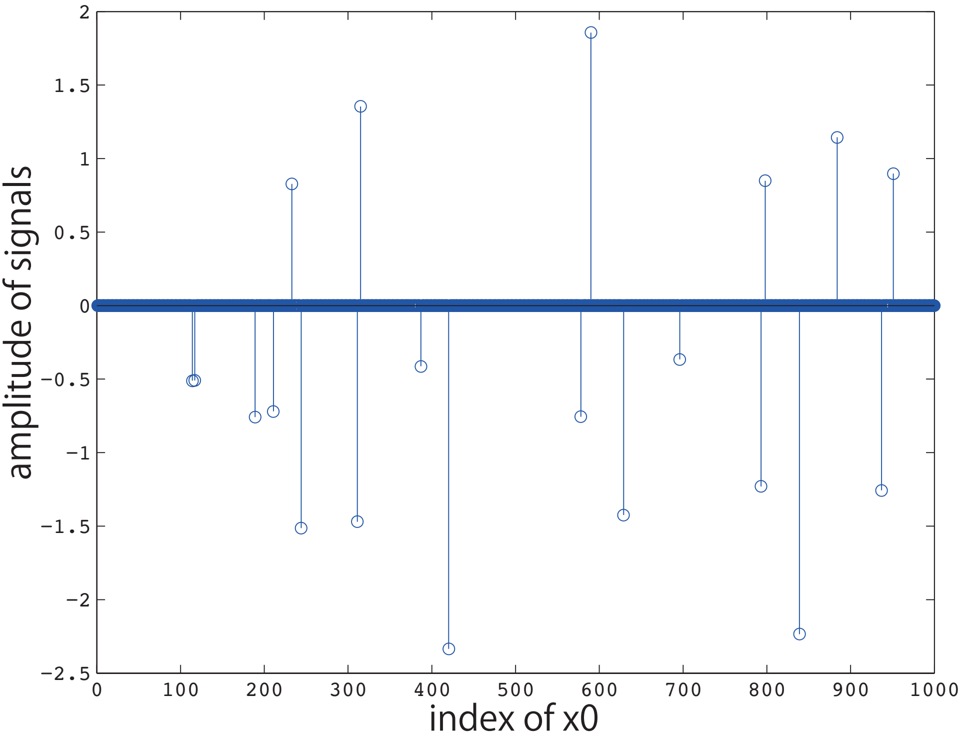
$$Q(t) = \int_t^\infty \frac{\mathrm{e}^{\frac{x^2}{2}}}{\sqrt{2\pi}} dx$$

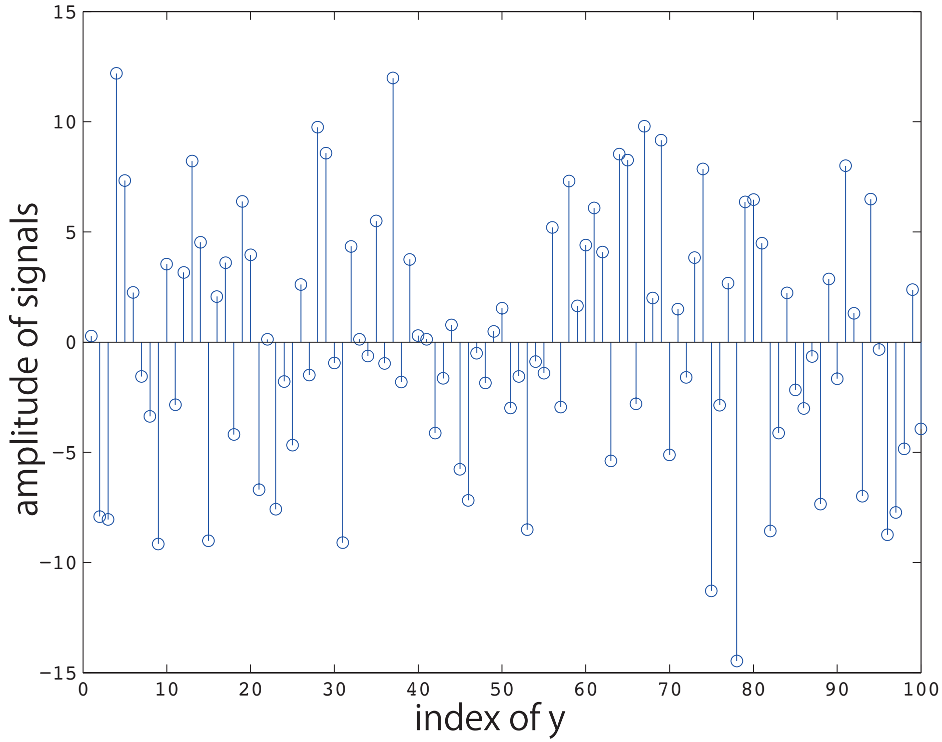


QUANTUM ANNEALING
MACHINE LEARNING
Sparse Modeling

実践例

- 基底追跡（M=100,N=1000,K=20,ガウスランダム観測行列）



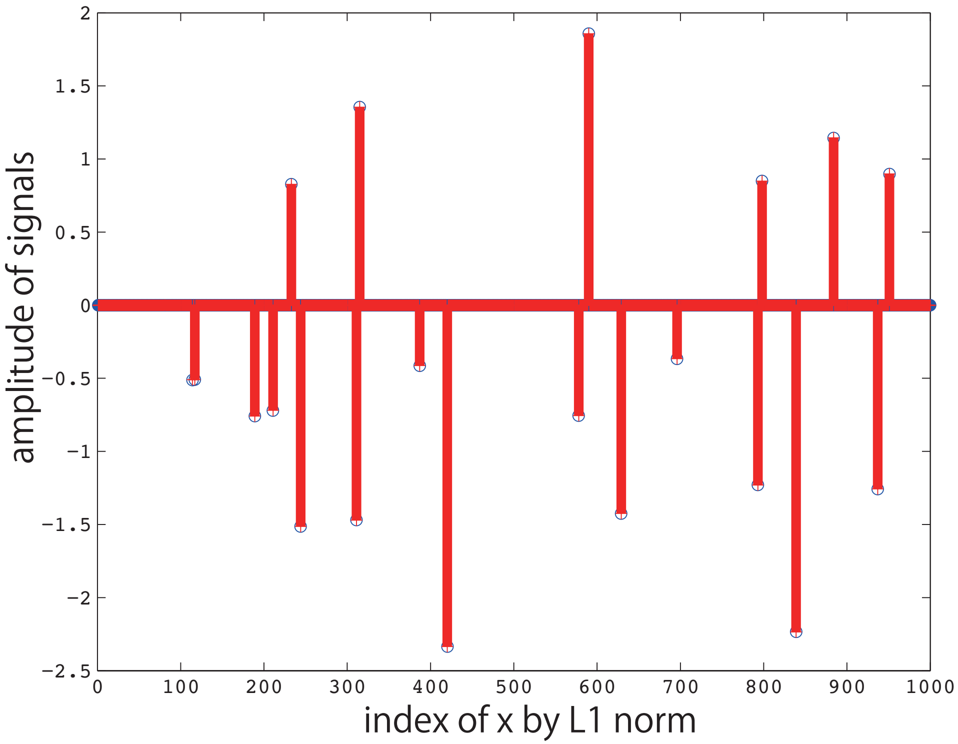


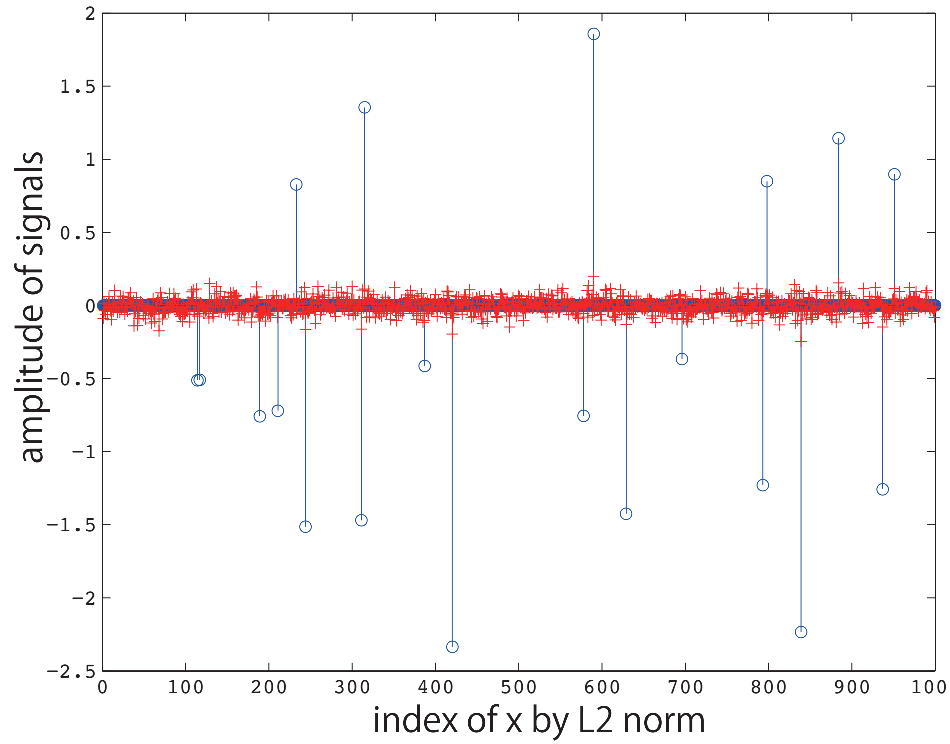
QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

Sparse Modeling

実践例

- 基底追跡（M=100,N=1000,K=20,ガウスランダム観測行列）





ノイズ有り圧縮センシング

- 観測結果にはノイズがつきもの？！
  - 加法的ノイズが混入した場合

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x} + \sigma_0 \mathbf{w}$$

ノイズ有り圧縮センシング

- 観測結果にはノイズがつきもの？！
  - 加法的ノイズが混入した場合

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x} + \sigma_0 \mathbf{w}$$

  - 等式制約はもはや成立しない
    - LASSO（Least Absolute Shrinkage and Selection Operators）

$$\min_{\mathbf{x}} \left\{ \|\mathbf{y} - A\mathbf{x}\|_2^2 \right\} \quad \text{s.t.} \quad \|\mathbf{x}\|_1 \leq a$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING
Sparse Modeling

ノイズ有り圧縮センシング

- 観測結果にはノイズがつきもの？！
  - 加法的ノイズが混入した場合

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x} + \sigma_0 \mathbf{w}$$

  - 等式制約はもはや成立しない
    - LASSO（Least Absolute Shrinkage and Selection Operators）

$$\min_{\mathbf{x}} \left\{ \|\mathbf{y} - A\mathbf{x}\|_2^2 \right\} \quad \text{s.t.} \quad \|\mathbf{x}\|_1 \leq a$$

    - ラグランジュ未定乗数法により等価な最適化問題

$$\min_{\mathbf{x}} \left\{ \frac{1}{2\lambda} \|\mathbf{y} - A\mathbf{x}\|_2^2 + \|\mathbf{x}\|_1 \right\}$$

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING Sparse Modeling

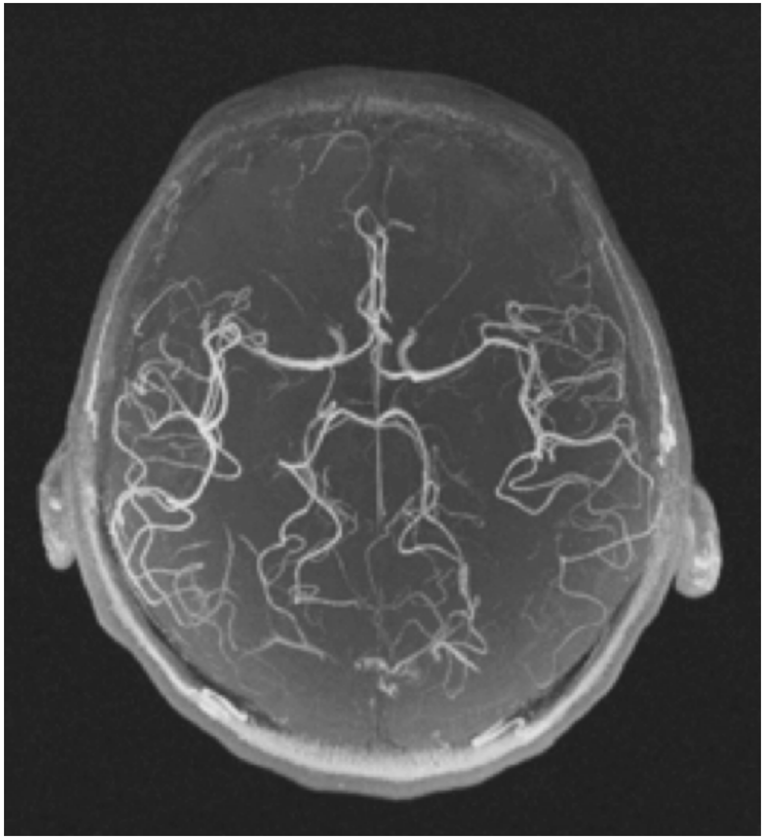
そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？

そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？
  - 実空間でのスパース性

$$\|\mathbf{x}\|_1$$



MRI画像の例

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING Sparse Modeling

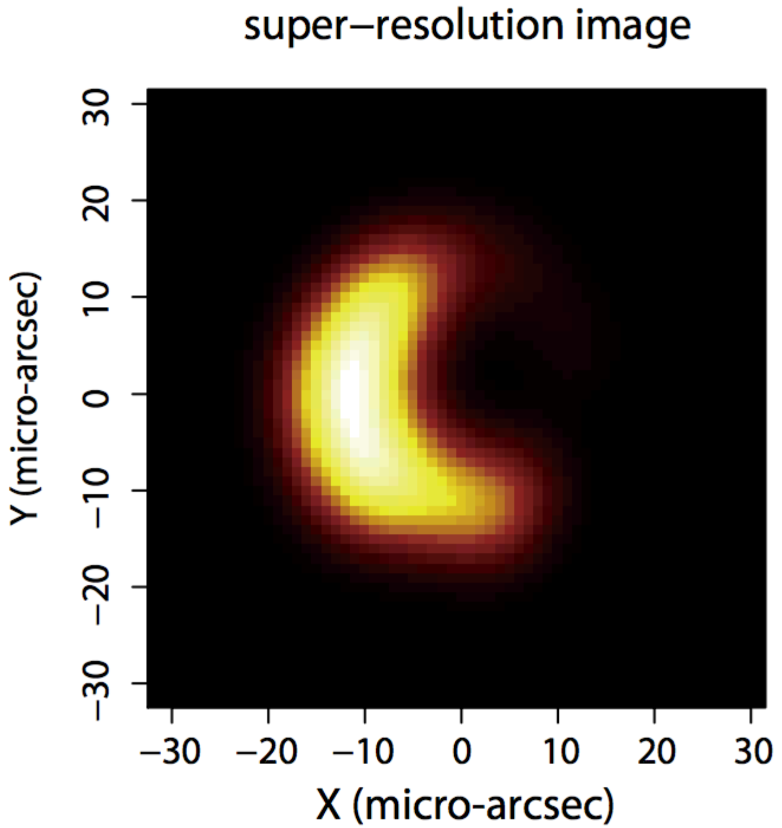
そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？
  - 実空間でのスパース性

$$\|\mathbf{x}\|_1$$

  - 隣接間差分のスパース性

$$\|\mathrm{TV}(\mathbf{x})\|_1$$



ブラックホール撮像の例
M. Honma et al. Publ. Astron. Soc. Jon. (2014)

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING Sparse Modeling

そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？
  - 実空間でのスパース性

$$\|\mathbf{x}\|_1$$

  - 隣接間差分のスパース性

$$\|\mathrm{TV}(\mathbf{x})\|_1$$

original image

自然画像の例

そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？
  - 実空間でのスパース性

$$\|\mathbf{x}\|_1$$

  - 隣接間差分のスパース性

$$\|\mathrm{TV}(\mathbf{x})\|_1$$

  - ウェーブレット変換によるスパース性

$$\|W(\mathbf{x})\|_1$$

自然画像の例

QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING

Sparse Modeling

そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？
  - 実空間でのスパース性

$$\|\mathbf{x}\|_1$$

  - 隣接間差分のスパース性

$$\|\mathrm{TV}(\mathbf{x})\|_1$$

  - ウェーブレット変換によるスパース性

$$\|W(\mathbf{x})\|_1$$

reconstructed image

自然画像の例

そもそも解はスパースなの？

- 観測したいものは本当にスパースだろうか？
  - 実空間でのスパース性

$$\|\mathbf{x}\|_1$$

  - 隣接間差分のスパース性

$$\|\mathrm{TV}(\mathbf{x})\|_1$$

  - ウェーブレット変換によるスパース性

$$\|W(\mathbf{x})\|_1$$

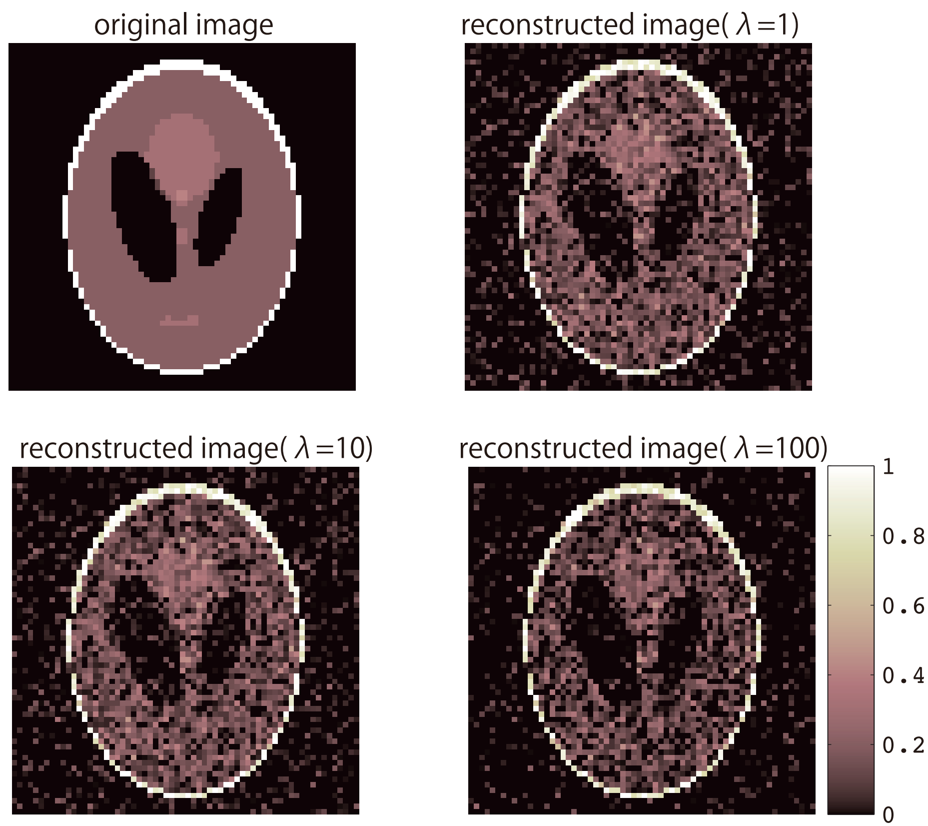
  - スパースモデリングで獲得するスパース性

reconstructed image

自然画像の例

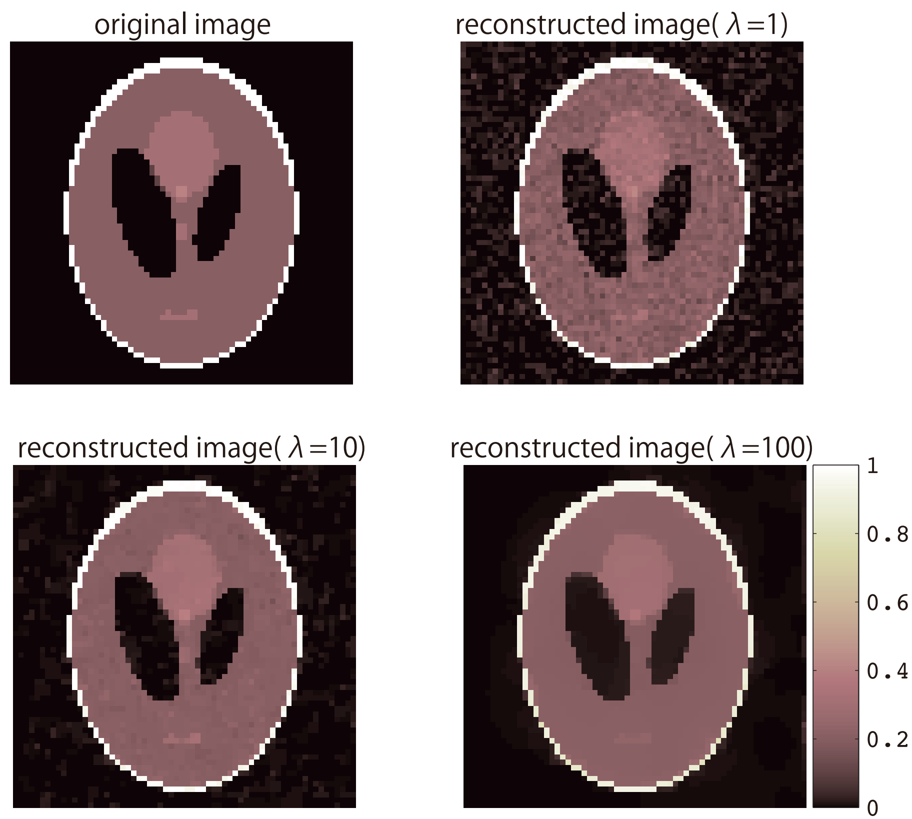
そもそも解はスパースなの？

- 実践例



そもそも解はスパースなの？

- 実践例



QUANTUM ANNEALING MACHINE LEARNING Sparse Modeling

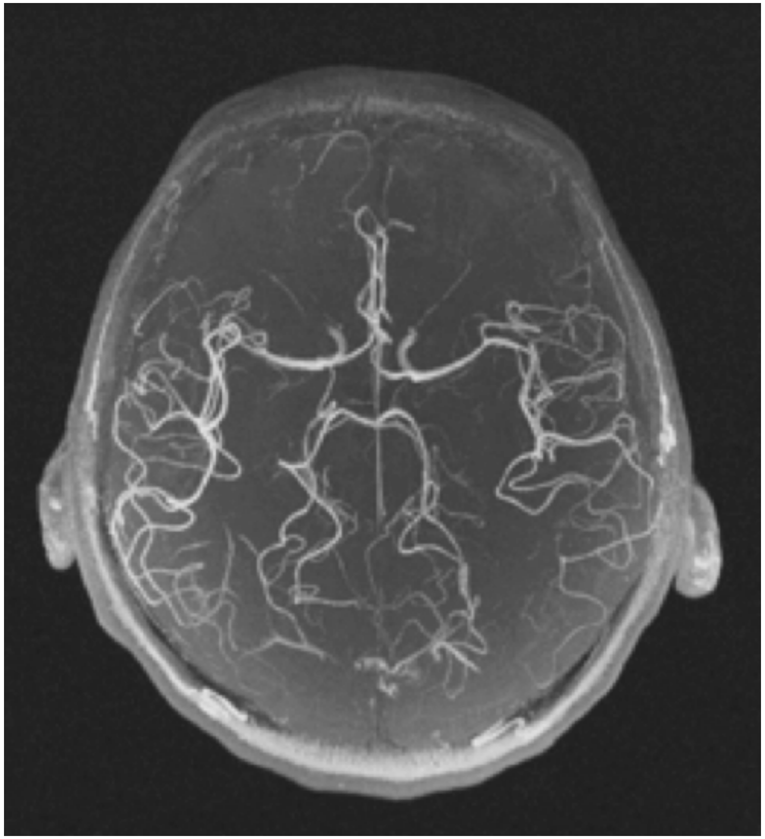
そもそも線形観測なの？

- 観測過程は線形変換で書かれるのか？

そもそも線形観測なの？

- 観測過程は線形変換で書かれるのか？
  - フーリエ変換部分行列+コイル強度

$$\mathbf{y} = FR\mathbf{x}_0 + \sigma_0\mathbf{w}$$



MRI画像の例

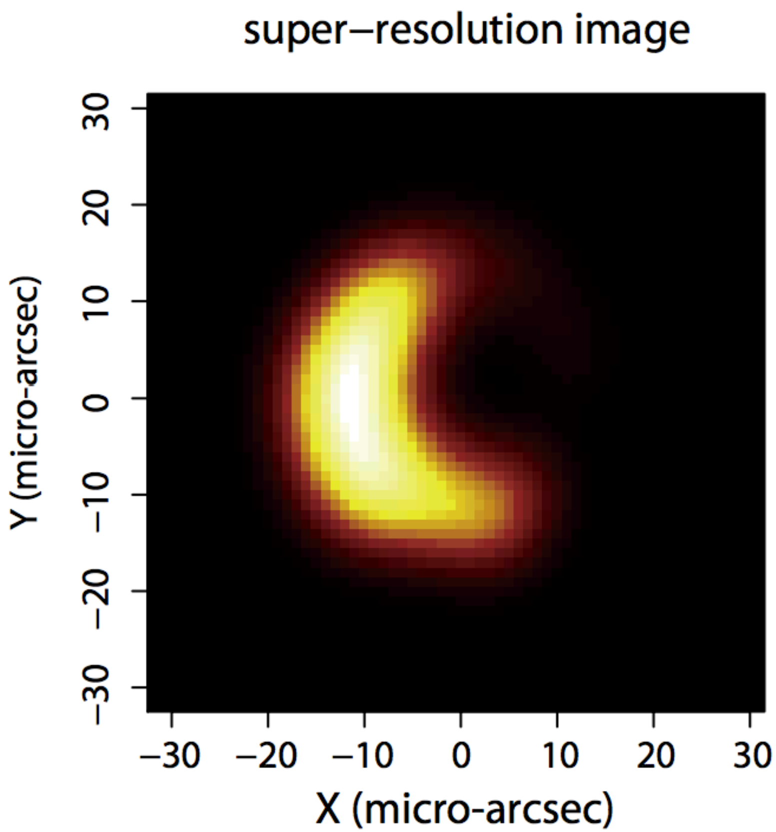
そもそも線形観測なの？

- 観測過程は線形変換で書かれるのか？
  - フーリエ変換部分行列+コイル強度

$$\mathbf{y} = FR\mathbf{x}_0 + \sigma_0\mathbf{w}$$

  - フーリエ変換部分行列＋天候要素

$$\mathbf{y} = FR\mathbf{x}_0 + \sigma_0\mathbf{w}$$



ブラックホール撮像の例

そもそも線形観測なの？

- 観測過程は線形変換で書かれるのか？
  - フーリエ変換部分行列+コイル強度

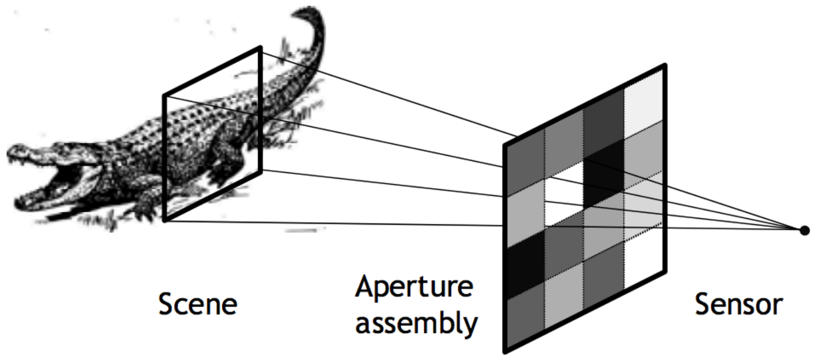
$$\mathbf{y} = FR\mathbf{x}_0 + \sigma_0 \mathbf{w}$$

  - フーリエ変換部分行列＋天候要素

$$\mathbf{y} = FR\mathbf{x}_0 + \sigma_0 \mathbf{w}$$

  - デザインした観測

$$\mathbf{y} = A\mathbf{x}_0 + \sigma_0 \mathbf{w}$$



Lenseless camera
G. Huang et al: arXiv:1305.7181