

Calcul numeric

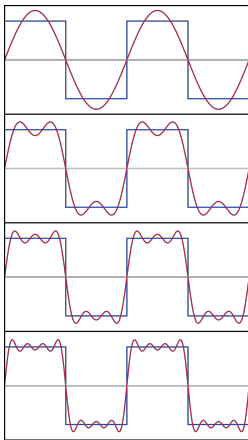
Reprezentări rare. Antrenarea dicționarelor.

Paul Irofti
Andrei Pătrașcu
Cristian Rusu

Departmentul de Informatică
Facultatea de Matematică și Informatică
Universitatea din București
Email: `prenume.nume@fmi.unibuc.ro`



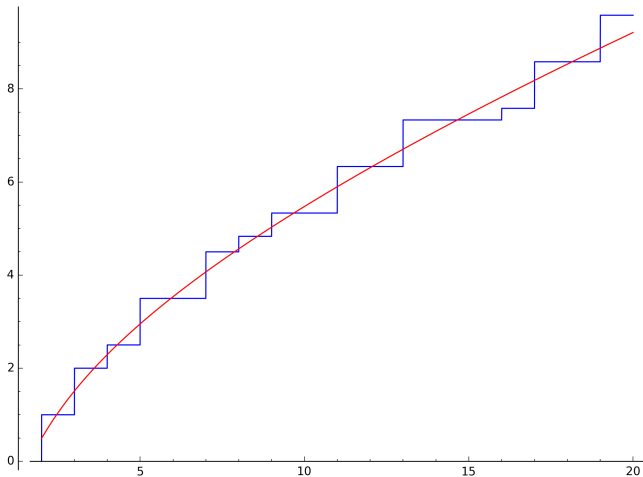
Aproximarea treptei cu sinusoidे



https://en.wikipedia.org/wiki/Fourier_series



Aproximarea sinusoidei cu trepte



<http://www.riemannhypothesis.info>



Reprezentare rară – *sparse representation* (SR)

Dat un semnal $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, apar câteva întrebări

- ▶ care este o bază "bună" pentru a-l reprezenta?
- ▶ care este numărul minim de $s < m$ vectori necesari pentru reprezentare dintr-o bază dată \mathbf{D} ?
- ▶ dar dacă pot alege eu baza cât este s ?



Reprezentare rară – *sparse representation* (SR)

Dat un semnal $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, apar câteva întrebări

- ▶ care este o bază "bună" pentru a-l reprezenta?
- ▶ care este numărul minim de $s < m$ vectori necesari pentru reprezentare dintr-o bază dată \mathbf{D} ?
- ▶ dar dacă pot alege eu baza cât este s ?

Răspuns: Aleg baza ce conține pe \mathbf{y} printre vectorii săi a.î. $s = 1$



Reprezentare rară – *sparse representation* (SR)

Dat un semnal $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, apar câteva întrebări

- ▶ care este o bază "bună" pentru a-l reprezenta?
- ▶ care este numărul minim de $s < m$ vectori necesari pentru reprezentare dintr-o bază dată \mathbf{D} ?
- ▶ dar dacă pot alege eu baza cât este s ?

Răspuns: Aleg baza ce conține pe \mathbf{y} printre vectorii săi a.î. $s = 1$

Ce se întâmplă dacă vreau să reprezint o familie de $N > m$ semnale diferite?



Reprezentare rară – *sparse representation* (SR)

Dat un semnal $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$, apar câteva întrebări

- ▶ care este o bază "bună" pentru a-l reprezenta?
- ▶ care este numărul minim de $s < m$ vectori necesari pentru reprezentare dintr-o bază dată \mathbf{D} ?
- ▶ dar dacă pot alege eu baza cât este s ?

Răspuns: Aleg baza ce conține pe \mathbf{y} printre vectorii săi a.î. $s = 1$

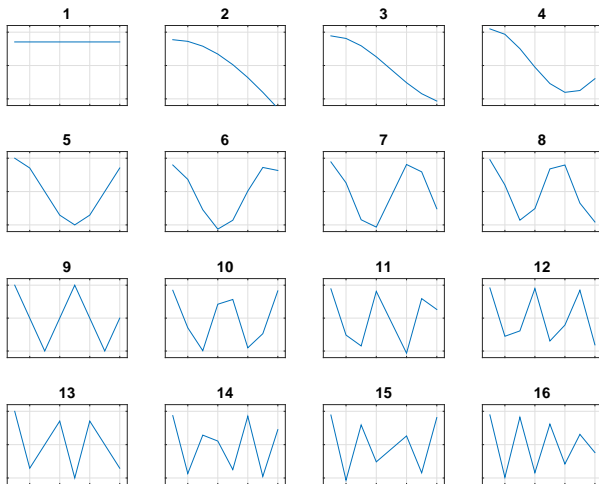
Ce se întâmplă dacă vreau să reprezint o familie de $N > m$ semnale diferite?

Răspuns: O soluție este să aleg o bază redundantă $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, unde $m < n$. \mathbf{D} se numește **dictionar** iar coloanele sale **atomi**.



Exemplu DCT cu $m = 8$ și $n = 16$

Coloanele 1 și 3 sunt baza canonică, iar 2 și 4 sunt redundante.

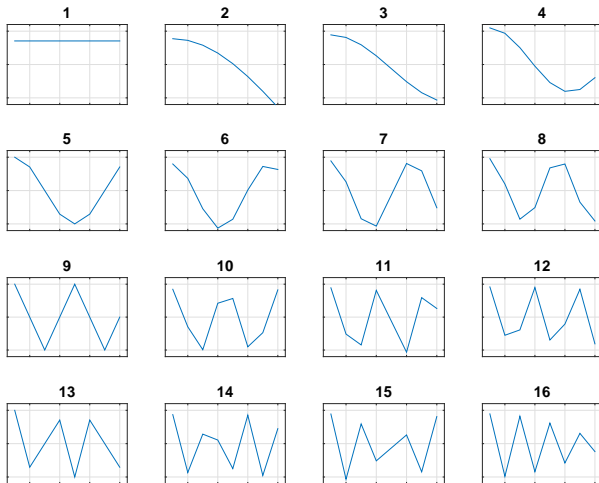


$$d_{ij} = \cos(\pi(i-1)(j-1)/n), \quad i = 1 : m, \quad j = 1 : n$$



Exemplu DCT cu $m = 8$ și $n = 16$

Cum se reprezintă $\mathbf{y} = 0.5\mathbf{d}_1 - 0.2\mathbf{d}_6$ canonic? Dar redundant?



$$d_{ij} = \cos(\pi(i-1)(j-1)/n), \quad i = 1 : m, \quad j = 1 : n$$

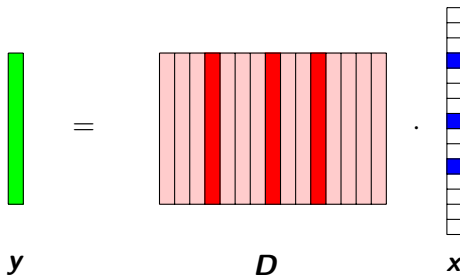


Țel reprezentări rare

Scopul nostru devine astfel să reprezentăm un semnal \mathbf{y} a.î.

$$\mathbf{y} = \mathbf{D}\mathbf{x} = \sum_{j=1}^n x_j \mathbf{d}_j = \sum_{j \in \mathcal{S}} x_j \mathbf{d}_j, \quad (1)$$

unde mulți x_j sunt zero, iar $\mathcal{S} = \{j \mid x_j \neq 0\}$ e suportul semnalului.



Definiție: \mathbf{x} se numește reprezentarea rară a lui \mathbf{y} .



Posibilități de alegere

Fie $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ și $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ date a.î.:

- ▶ știm că \mathbf{y} există într-un subspațiu de dimensiune s
- ▶ acest subspațiu este mic în comparație cu \mathbb{R}^m
- ▶ deci reprezentarea rară \mathbf{x} are avea un suport $|\mathcal{S}| = s$

Câte posibilități de alegere a unui set de s atomi din dicționar am?



Posibilități de alegere

Fie $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ și $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ date a.î.:

- ▶ știm că \mathbf{y} există într-un subspațiu de dimensiune s
- ▶ acest subspațiu este mic în comparație cu \mathbb{R}^m
- ▶ deci reprezentarea rară \mathbf{x} are avea un suport $|\mathcal{S}| = s$

Câte posibilități de alegere a unui set de s atomi din dicționar am?

Răspuns: $\binom{n}{s} \approx n^s/s!$



Posibilități de alegere

Fie $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ și $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ date a.î.:

- ▶ știm că \mathbf{y} există într-un subspațiu de dimensiune s
- ▶ acest subspațiu este mic în comparație cu \mathbb{R}^m
- ▶ deci reprezentarea rară \mathbf{x} are avea un suport $|\mathcal{S}| = s$

Câte posibilități de alegere a unui set de s atomi din dicționar am?

Răspuns: $\binom{n}{s} \approx n^s/s!$

Dar dintr-o bază?



Posibilități de alegere

Fie $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ și $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ date a.î.:

- ▶ știm că \mathbf{y} există într-un subspațiu de dimensiune s
- ▶ acest subspațiu este mic în comparație cu \mathbb{R}^m
- ▶ deci reprezentarea rară \mathbf{x} are avea un suport $|\mathcal{S}| = s$

Câte posibilități de alegere a unui set de s atomi din dicționar am?

Răspuns: $\binom{n}{s} \approx n^s / s!$

Dar dintr-o bază?

Răspuns: $\binom{m}{s} \approx m^s / s!$



Posibilități de alegere

Fie $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$ și $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ date a.î.:

- ▶ știm că \mathbf{y} există într-un subspațiu de dimensiune s
- ▶ acest subspațiu este mic în comparație cu \mathbb{R}^m
- ▶ deci reprezentarea rară \mathbf{x} are avea un suport $|\mathcal{S}| = s$

Câte posibilități de alegere a unui set de s atomi din dicționar am?

Răspuns: $\binom{n}{s} \approx n^s/s!$

Dar dintr-o bază?

Răspuns: $\binom{m}{s} \approx m^s/s!$

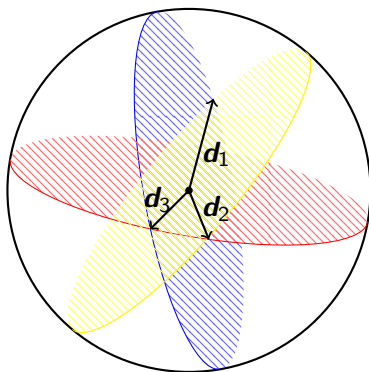
Deci dicționarul este mai bogat cu $(n/m)^s$ posibili candidați. (Ce presupunere am făcut legată de atomii dicționarului?)



Exemplu: subspații $s = 2$, $m = n = 3$

Doar $\binom{3}{2} = 3$ subspații pot fi obținute.

- ▶ d_1 și d_2 generează subspațiul galben
- ▶ d_1 și d_3 generează subspațiul albastru
- ▶ d_2 și d_3 generează subspațiul roșu



Pentru $n = 6$ ar fi $\binom{6}{2} = 15$ subspații posibile!



Formularea exactă

$$\begin{array}{ll} \min_{\mathbf{x}} & \|\mathbf{x}\|_0 \\ \text{s.t.} & \mathbf{y} = \mathbf{D}\mathbf{x} \end{array} \quad (2)$$

unde $\|\cdot\|_0$ este pseudo-norma-zero care numără elemente nenule.

De ce este o $\|\cdot\|_0$ o pseudo-normă? Ce proprietate nu îndeplinește?

Dacă ar exista o astfel de soluție, cât de ușor ar fi să o găsim?



Problema de optimizare

O formulare mai relaxată a problemei precedente

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & \|\mathbf{x}\|_0 \\ \text{s.t.} \quad & \|\mathbf{y} - \mathbf{D}\mathbf{x}\| \leq \varepsilon \end{aligned} \tag{3}$$

unde ε este o toleranță acceptată.

Putem căuta o soluție urmărind ca suportul să fie cât mai rar:

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{x}} \quad & \|\mathbf{y} - \mathbf{D}\mathbf{x}\|^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|\mathbf{x}\|_0 \leq s \end{aligned} \tag{4}$$

Aceste soluții se pretează foarte bine cazului în care semnalul măsurat este perturbat de un zgomot \mathbf{v}

$$\mathbf{y} = \mathbf{D}\mathbf{x} + \mathbf{v}. \tag{5}$$

care se pierde în urma aproximării



Greedy

- ▶ construiesc suportul adăugând câte un atom la fiecare iterație
- ▶ rezolvă o sub-problemă restrânsă la pasul curent
- ▶ sunt foarte rapizi

Relaxare convexă

- ▶ înlocuiesc norma-0 cu norma-1
- ▶ problema se transformă într-o problemă de optimizare convexă
- ▶ norma-1 promovează soluțiile rare (dar nu la fel de rare ca norma-0)
- ▶ norma-1 poate fi mutată ca regularizare în obiectiv pentru a controla mai bine cât de rară va fi soluția



Orthogonal Matching Pursuit (OMP)

- ▶ cel mai popular algoritm (greedy)
- ▶ construiește iterativ suportul \mathcal{S}
- ▶ folosește reziduu curent

$$\mathbf{e} = \mathbf{y} - \sum_{j \in \mathcal{S}} x_j \mathbf{d}_j. \quad (6)$$

- ▶ pentru a alege atomul ce corelează cel mai mult cu el

$$|\mathbf{e}^T \mathbf{d}_k| = \max_{j \notin \mathcal{S}} |\mathbf{e}^T \mathbf{d}_j|. \quad (7)$$

- ▶ după care recalculează coeficienții din \mathbf{x}

$$\mathbf{x}_{\mathcal{S}} = (\mathbf{D}_{\mathcal{S}}^T \mathbf{D}_{\mathcal{S}})^{-1} \mathbf{D}_{\mathcal{S}}^T \mathbf{y}, \quad (8)$$



Algorithm 1: Orthogonal Matching Pursuit

Data: dictionary $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$

signal $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$

sparsity level s

stopping error ε

Result: representation support \mathcal{S} , solution \mathbf{x}

- 1 Initialize $\mathcal{S} = \emptyset$, $\mathbf{e} = \mathbf{y}$
- 2 **while** $|\mathcal{S}| < s$ and $\|\mathbf{e}\| > \varepsilon$ **do**
- 3 Find new index: $k = \arg \max_{j \notin \mathcal{S}} |\mathbf{e}^T \mathbf{d}_j|$
- 4 Build new support: $\mathcal{S} \leftarrow \mathcal{S} \cup \{k\}$
- 5 Compute new solution: $\mathbf{x}_{\mathcal{S}} = (\mathbf{D}_{\mathcal{S}}^T \mathbf{D}_{\mathcal{S}})^{-1} \mathbf{D}_{\mathcal{S}}^T \mathbf{y}$
- 6 Compute new residual: $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{D}_{\mathcal{S}} \mathbf{x}_{\mathcal{S}}$



Algorithm 2: Orthogonal Matching Pursuit $O(ms(n + s^2))$

Data: dictionary $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$

signal $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^m$

sparsity level s

stopping error ε

Result: representation support \mathcal{S} , solution \mathbf{x}

- 1 Initialize $\mathcal{S} = \emptyset$, $\mathbf{e} = \mathbf{y}$
 - 2 **while** $|\mathcal{S}| < s$ and $\|\mathbf{e}\| > \varepsilon$ **do**
 - 3 Find new index: $k = \arg \max_{j \notin \mathcal{S}} |\mathbf{e}^T \mathbf{d}_j|$ $O(mn)$
 - 4 Build new support: $\mathcal{S} \leftarrow \mathcal{S} \cup \{k\}$
 - 5 Compute new solution: $\mathbf{x}_{\mathcal{S}} = (\mathbf{D}_{\mathcal{S}}^T \mathbf{D}_{\mathcal{S}})^{-1} \mathbf{D}_{\mathcal{S}}^T \mathbf{y}$ $O(ms^2)$
 - 6 Compute new residual: $\mathbf{e} = \mathbf{y} - \mathbf{D}_{\mathcal{S}} \mathbf{x}_{\mathcal{S}}$ $O(ms)$
-



Definiție

Un dicționar \mathbf{D} satisface restricted isometry property (RIP) dacă pentru orice bloc de s coloane $\tilde{\mathbf{D}}$ constanta δ_s este cea mai mică a.î.

$$(1 - \delta_s)\|\mathbf{x}\|^2 \leq \|\tilde{\mathbf{D}}\mathbf{x}\|^2 \leq (1 + \delta_s)\|\mathbf{x}\|^2 \quad (9)$$

pentru orice vector \mathbf{x} de dimensiune s .

Propoziție

OMP găsește cea mai rară soluție dacă $\delta_{s+1} < \frac{\sqrt{4s+1} - 1}{2s}$.



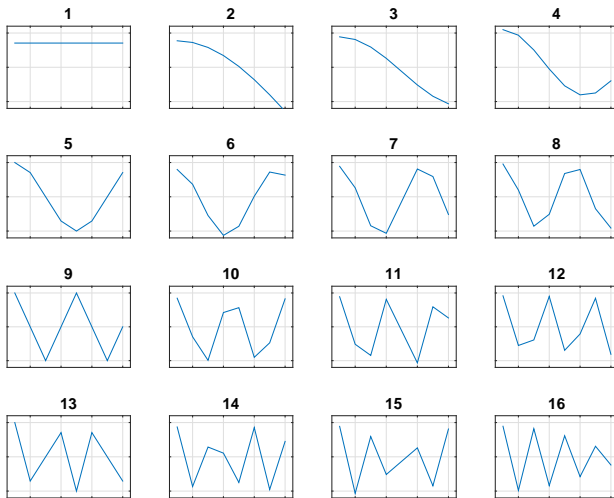
Alegerea dicționarului

- ▶ ortogonal: DFT, DCT, wavelet
- ▶ redundant: exemplul cu DCT de mai devreme
- ▶ aleator: cu proprietăți bune (ex. RIP)
- ▶ structurat: compunerea a mai multor transformări (DCT+wavelet)
- ▶ învățat: dicționarul este adaptat pentru un set de N semnale de antrenare dat (*dictionary learning (DL)*)



Exemplu învățare cu $m = 8$ și $n = 16$

Inițializare cu DCT redundant

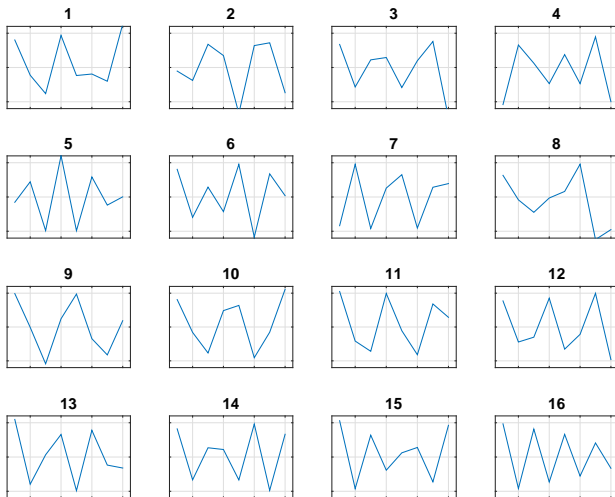


Semnale de antrenare $\eta_i = \cos(2\pi i\omega/m)$, $\omega \in [\frac{m}{4}, \frac{m}{2}]$



Exemplu învățare cu $m = 8$ și $n = 16$

După antrenare



Rezultat: reprezentări rare cu eroarea de două ori mai mică.



Problema de antrenare

Date semnalele de antrenare $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{m \times N}$ și s , antrenarea dicționarului \mathbf{D} presupune rezolvarea problemei de optimizare

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{D}, \mathbf{X}} \quad & \|\mathbf{Y} - \mathbf{DX}\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|\mathbf{x}_\ell\|_0 \leq s, \ell = 1 : N \\ & \|\mathbf{d}_j\| = 1, j = 1 : n \end{aligned} \tag{10}$$

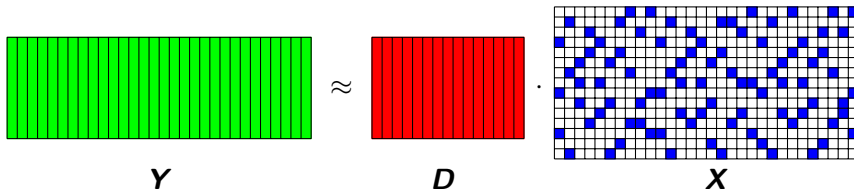
unde variabilele sunt $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ și $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times N}$.

De ce e nevoie de normalizarea atomilor?



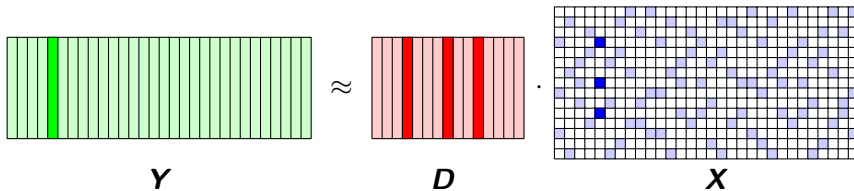
Exemplu: Problema de antrenare

Aproximarea $Y \approx DX$ trebuie să fie cât mai bună.



Exemplu: Problema de antrenare

Contribuția unui singur semnal



Eroarea de reprezentare \mathbf{E} este

$$\mathbf{E} = \mathbf{Y} - \mathbf{DX} \quad (11)$$

Iar obiectivul (10) poate fi rescris drept

$$\|\mathbf{E}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{\ell=1}^N e_{i\ell}^2}. \quad (12)$$

sau partiționat pe semnale

$$\|\mathbf{E}\|_F^2 = \sum_{\ell=1}^N \|\mathbf{e}_\ell\|^2 = \sum_{\ell=1}^N \|\mathbf{y}_\ell - \mathbf{D}\mathbf{x}_\ell\|^2, \quad (13)$$



Subprobleme

Având în vedere că (10) este o problemă biliniară, în practică problema este împărțită în două.

Problema de reprezentare (sau de codare rară)

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{X}} \quad & \|\mathbf{Y} - \mathbf{DX}\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & \|\mathbf{x}_\ell\|_0 \leq s, \ell = 1 : N \end{aligned} \tag{14}$$

și problema actualizării dicționarului

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{D}, (\mathbf{X})} \quad & \|\mathbf{Y} - \mathbf{DX}\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & \mathbf{X}_{\Omega^c} = 0 \\ & \|\mathbf{d}_j\| = 1, j = 1 : n \end{aligned} \tag{15}$$

unde Ω reprezintă pozițiile cu elemente nenule din \mathbf{X} , iar Ω^c setul complementar.



Algorithm 3: Optimizare alternativă

Data: semnale $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{m \times N}$
raritate s
dicționar inițial $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
număr de iterații K

Result: dicționar antrenat \mathbf{D}

- 1 **for** $k = 1 : K$ **do**
- 2 Codificare: păstrând \mathbf{D} fixat, rezolvăm (14) pentru a
 calcula reprezentările rare \mathbf{X}
- 3 Actualizarea dicționarului: păstrând tiparul nenul Ω fixat,
 rezolvăm (15) pentru a calcula dicționarul nou \mathbf{D} ;
 matricea \mathbf{X} poate fi actualiată sau nu
- 4 Normarea atomilor, dacă nu a fost efectuată deja:
 $\mathbf{d}_j \leftarrow \mathbf{d}_j / \|\mathbf{d}_j\|, j = 1 : n$



Coordinate Descent (CD)

Observăm că produsul \mathbf{DX} poate fi scris în funcție de fiecare atom

$$\mathbf{DX} = \sum_{i=1}^n \mathbf{d}_i \mathbf{x}_i^T. \quad (16)$$

deci contribuția atomului j poate fi separată

$$\|\mathbf{Y} - \mathbf{DX}\| = \left\| \mathbf{Y} - \sum_{i \neq j} \mathbf{d}_i \mathbf{x}_i^T - \mathbf{d}_j \mathbf{x}_j^T \right\|. \quad (17)$$

unde partea fixă este

$$\mathbf{F} = \left[\mathbf{Y} - \sum_{i \neq j} \mathbf{d}_i \mathbf{x}_i^T \right]_{\mathcal{I}_j}, \quad (18)$$

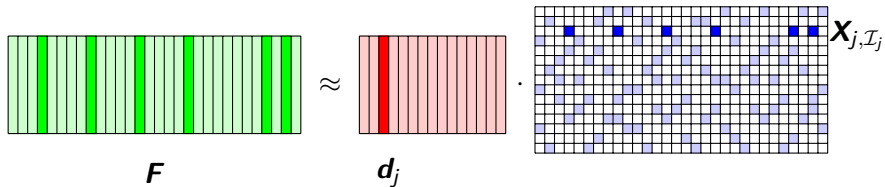
iar actualizarea atomului \mathbf{d}_j implică rezolvarea problemei

$$\min_{\mathbf{d}_j} \left\| \mathbf{F} - \mathbf{d}_j \mathbf{X}_{j, \mathcal{I}_j} \right\|_{\mathbf{F}}^2 \quad (19)$$



Exemplu: actualizarea atomului d_j

Problema aproximării (19) este



Propoziție

Soluția problemei (19) este

$$\mathbf{d} = \frac{\mathbf{F}\mathbf{x}}{\|\mathbf{x}\|^2}. \quad (20)$$

Demonstrație folosind trasa și proprietatea $\text{tr}(\mathbf{ABC}) = \text{tr}(\mathbf{BCA})$.

$$\begin{aligned} \|\mathbf{F} - \mathbf{d}\mathbf{x}^T\|_F^2 &= \text{tr}[(\mathbf{F}^T - \mathbf{x}\mathbf{d}^T)(\mathbf{F} - \mathbf{d}\mathbf{x}^T)] \\ &= \text{tr}(\mathbf{F}^T\mathbf{F}) - 2\text{tr}(\mathbf{F}^T\mathbf{d}\mathbf{x}^T) + \text{tr}(\mathbf{x}\mathbf{d}^T\mathbf{d}\mathbf{x}^T) \quad (21) \\ &= \|\mathbf{F}\|_F^2 - 2\mathbf{x}^T\mathbf{F}^T\mathbf{d} + \|\mathbf{x}\|^2\mathbf{d}^T\mathbf{d}. \end{aligned}$$



Propoziție

Soluția problemei

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{d}} \quad & \left\| \mathbf{F} - \mathbf{d}\mathbf{x}^T \right\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & \left\| \mathbf{d} \right\| = 1 \end{aligned} \tag{22}$$

este

$$\mathbf{d} = \frac{\mathbf{F}\mathbf{x}}{\left\| \mathbf{F}\mathbf{x} \right\|}. \tag{23}$$

Această soluție mai este soluția problemei CD?



- ▶ cel mai popular algoritm de antrenare de dicționar
- ▶ actualizează simultan atomul și reprezentările ce îl folosesc

$$\begin{aligned} \min_{\mathbf{d}, \mathbf{x}} \quad & \left\| \mathbf{F} - \mathbf{d}\mathbf{x}^T \right\|_F^2 \\ \text{s.t.} \quad & \left\| \mathbf{d} \right\| = 1 \end{aligned} \tag{24}$$

- ▶ poate fi privit drept o formă bloc a CD



Propoziție

Fie descompunerea SVD a matricei \mathbf{F}

$$\mathbf{F} = \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T, \quad (25)$$

atunci soluția problemei (24) este

$$\mathbf{d} = \mathbf{u}_1, \quad \mathbf{x} = \sigma_1 \mathbf{v}_1. \quad (26)$$



Algorithm 4: Actualizare K-SVD

Data: semnalele $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{m \times N}$
dicționarul actual $\mathbf{D} \in \mathbb{R}^{m \times n}$
reprezentările $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times N}$

Result: dicționarul actualizat \mathbf{D}

- 1 Eroarea de calcul $\mathbf{E} = \mathbf{Y} - \mathbf{DX}$
- 2 **for** $j = 1$ **to** n **do**
- 3 Modificarea erorii: $\mathbf{F} = \mathbf{E}_{\mathcal{I}_j} + \mathbf{d}_j \mathbf{X}_{j, \mathcal{I}_j}$
- 4 Calculul primei valori singulare σ_1 a lui \mathbf{F} împreună cu
 vectorii singulari asociați \mathbf{u}_1 and \mathbf{v}_1
- 5 Actualizarea atomului și a reprezentărilor:
 $\mathbf{d}_j = \mathbf{u}_1, \mathbf{X}_{j, \mathcal{I}_j} = \sigma_1 \mathbf{v}_1^T$
- 6 Recalcularea erorii: $\mathbf{E}_{\mathcal{I}_j} = \mathbf{F} - \mathbf{d}_j \mathbf{X}_{j, \mathcal{I}_j}$



- ▶ eliminarea zgomotului (*denoising*)
- ▶ completarea unei imagini (*inpainting*)
- ▶ compresie
- ▶ clasificare
- ▶ rezumarea colecțiilor de imagini (*image collection summarization*)
- ▶ rezumarea video (*video summarization*)
- ▶ albume foto (*photo albuming*)



Exemplu: eliminarea zgomotului



Original



Noisy



Cleaned



Overlapping Patches

