

Day 2

方程式が足りない！どう解く？

Underdetermined problems

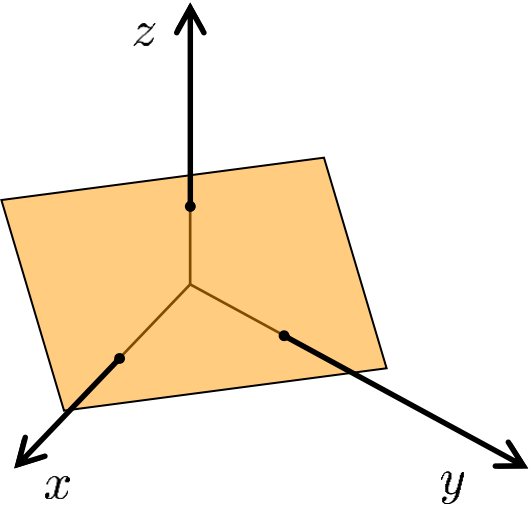
劣決定問題の近似解

最小長さ解

正則化

一次方程式

$$x + y + z = 1$$



連立一次方程式

$$Ax = b$$

$$\begin{cases} x + y + z = 1 \\ x + 2y + 3z = 2 \\ x + z = -2 \end{cases}$$



問

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \\ x_1 + x_3 = -2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

劣決定の連立方程式

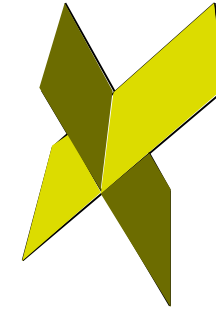
Underdetermined problem

方程式 m 本 < 未知数 n 個

例:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$



劣決定の連立方程式

Underdetermined problem

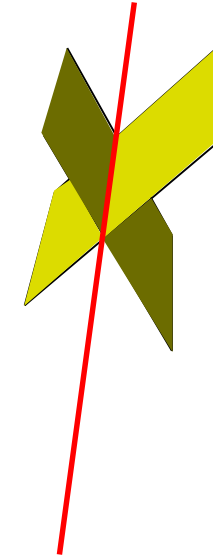
方程式 m 本 < 未知数 n 個

- 解が1つに決まらない
- 例では, 直線上の点すべてが解の候補

例:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$



連立一次方程式 = 配合量を求める問題

混合物 \mathbf{b} は,

- どの材料 (= ベクトル $\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \dots, \mathbf{a}^{(n)} \in \mathbb{R}^m$) が使われているか?
- それぞれの配合量 (= x_1, x_2, \dots, x_n) はいくらか?

$$x_1 \mathbf{a}^{(1)} + x_2 \mathbf{a}^{(2)} + \dots + x_n \mathbf{a}^{(n)} = \mathbf{b} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}^{(1)} \dots \mathbf{a}^{(n)}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

例:

$$x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + x_3 \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

優決定の連立方程式

Overdetermined problem

方程式 m 本 $>$ 未知数 n 個

例:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \\ x_1 + x_3 = -2 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$



優決定の連立方程式

Overdetermined problem

方程式 m 本 $>$ 未知数 n 個

□ 解が存在しない

例:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \\ x_1 + x_3 = -2 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$



何らかの条件や情報, 事前知識を使って, 問題の解をひとつに限定すること.

色々な正則化の方法があります. いくつか後で紹介します.

- 解の ℓ_2 ノルムが小さいという条件: ℓ_2 正則化 (ℓ_2 regularization)
 - リッジ回帰 (ridge regression), ティコノフ正則化 (Tikhonov regularization)

- 解の非ゼロ成分の数が少ないという条件: スパース正則化 (sparse regularization)
 ℓ_0 最小化 (ℓ_0 regularization), ℓ_1 最小化 (ℓ_1 regularization)
 - ℓ_1 正則化最小二乗法 (ℓ_1 -LS), LASSO回帰 (LASSO regression)
 - 基底追跡 (basis pursuit; BP)
 - 基底追跡ノイズ除去 (basis pursuit denoising; BPDN)
 - LASSO (least absolute shrinkage and selection operator)

How to count nonzeros?

Sparsity-inducing norms ($p \leq 1$)

ℓ_p ノルム

$$\|\mathbf{x}\|_p^p = |x_1|^p + \dots + |x_n|^p$$

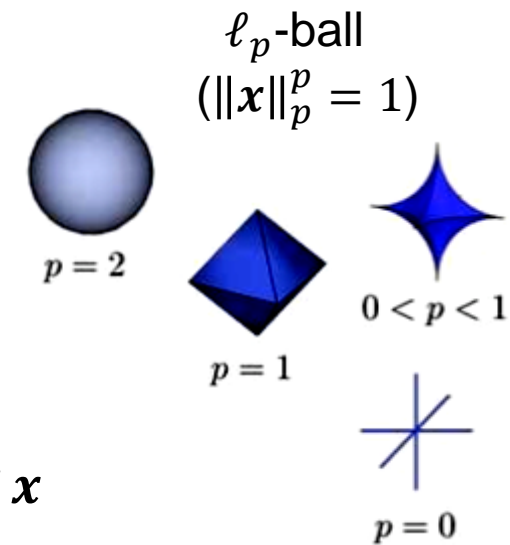
- $p = 2$ ℓ_2 ノルム

$$\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{|x_1|^2 + \dots + |x_n|^2}$$

- $p = 1$ ℓ_1 ノルム

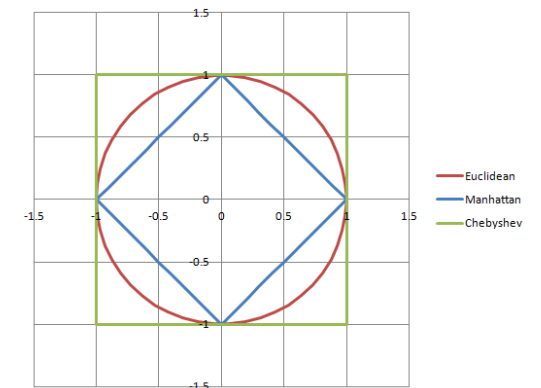
$$\|\mathbf{x}\|_1 = |x_1| + \dots + |x_n|$$

- $p \rightarrow 0$ ℓ_0 ノルム $\lim_{p \rightarrow 0} \|\mathbf{x}\|_p^p = \text{\# of nonzero entries of } \mathbf{x}$



```
import numpy as np
# define a function of computing Lp norm to the power p
lpnormp = lambda x,p: sum(abs(x)**p)

# observe if the Lp norm converges to no. of nonzeros if p->0
x = np.array([1, 2, 0, 3, 0, 0, 4])
print(lpnormp(x, 1))           # 10
print(lpnormp(x, 0.5))         # 6.14626436994
print(lpnormp(x, 0.1))         # 4.33659499157
print(lpnormp(x, 0.01))        # 4.03196172178
```



最小長さ解

Minimum length solution

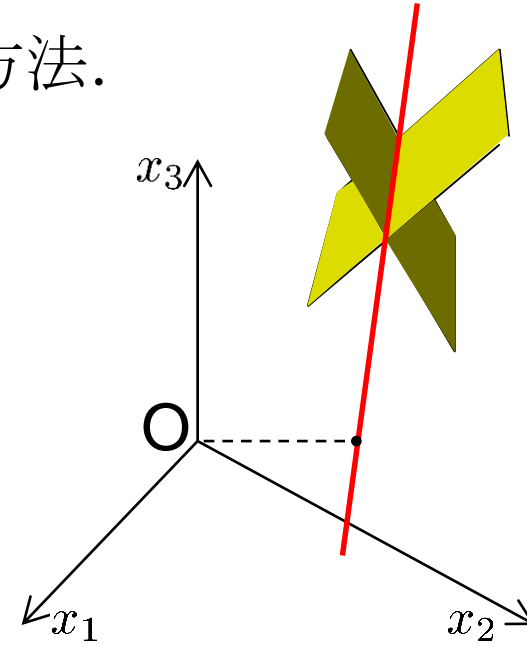
解の候補のうち, 原点に最も近いものを解に選ぶ方法.

$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{x}\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

問

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$



最小長さ解

Minimum length solution

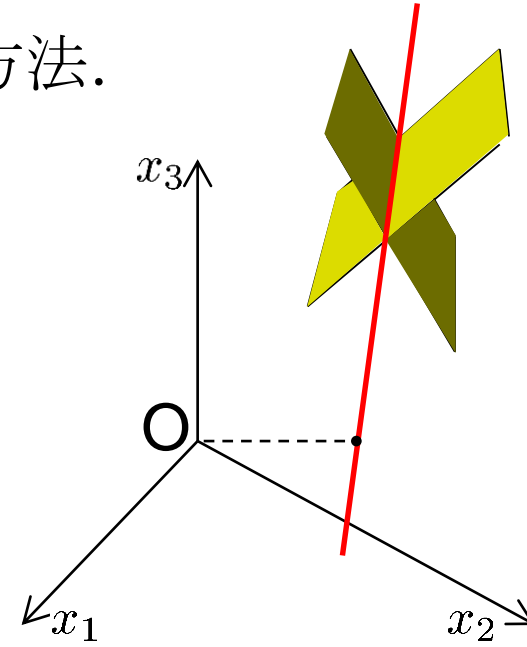
解の候補のうち、原点に最も近いものを解に選ぶ方法.

$$\min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

問

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$



$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t \\ 1 - 2t \\ t \end{bmatrix}$$

$$\|\mathbf{x}\|_2^2 = t^2 + (1 - 2t)^2 + t^2 = 6t^2 - 4t + 1$$

$$t = 1/3$$

最小長さ解

Minimum length solution

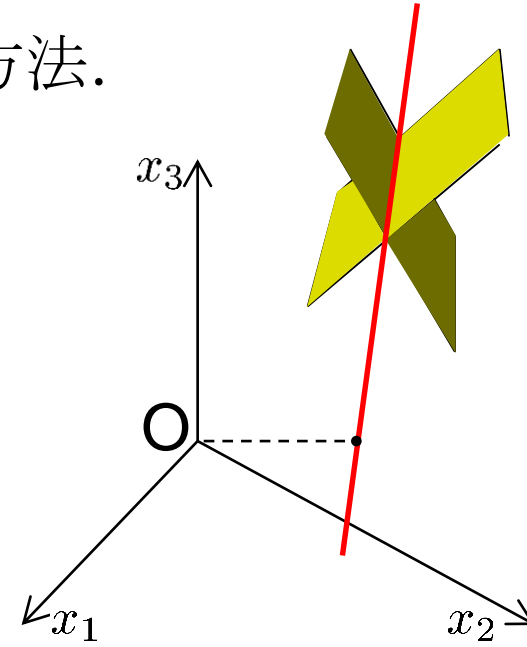
解の候補のうち、原点に最も近いものを解に選ぶ方法.

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^* &= \arg \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_2^2 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ &= \mathbf{A}^\top (\mathbf{A}\mathbf{A}^\top)^{-1} \mathbf{b} \end{aligned}$$

問

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = 1 \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2 \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$





多すぎるのは良くないことだ

More is less: when a linear system has a unique solution
劣決定問題のスパース解

味見してレシピを推定する



各食材を使用する
グラム数を求めたい



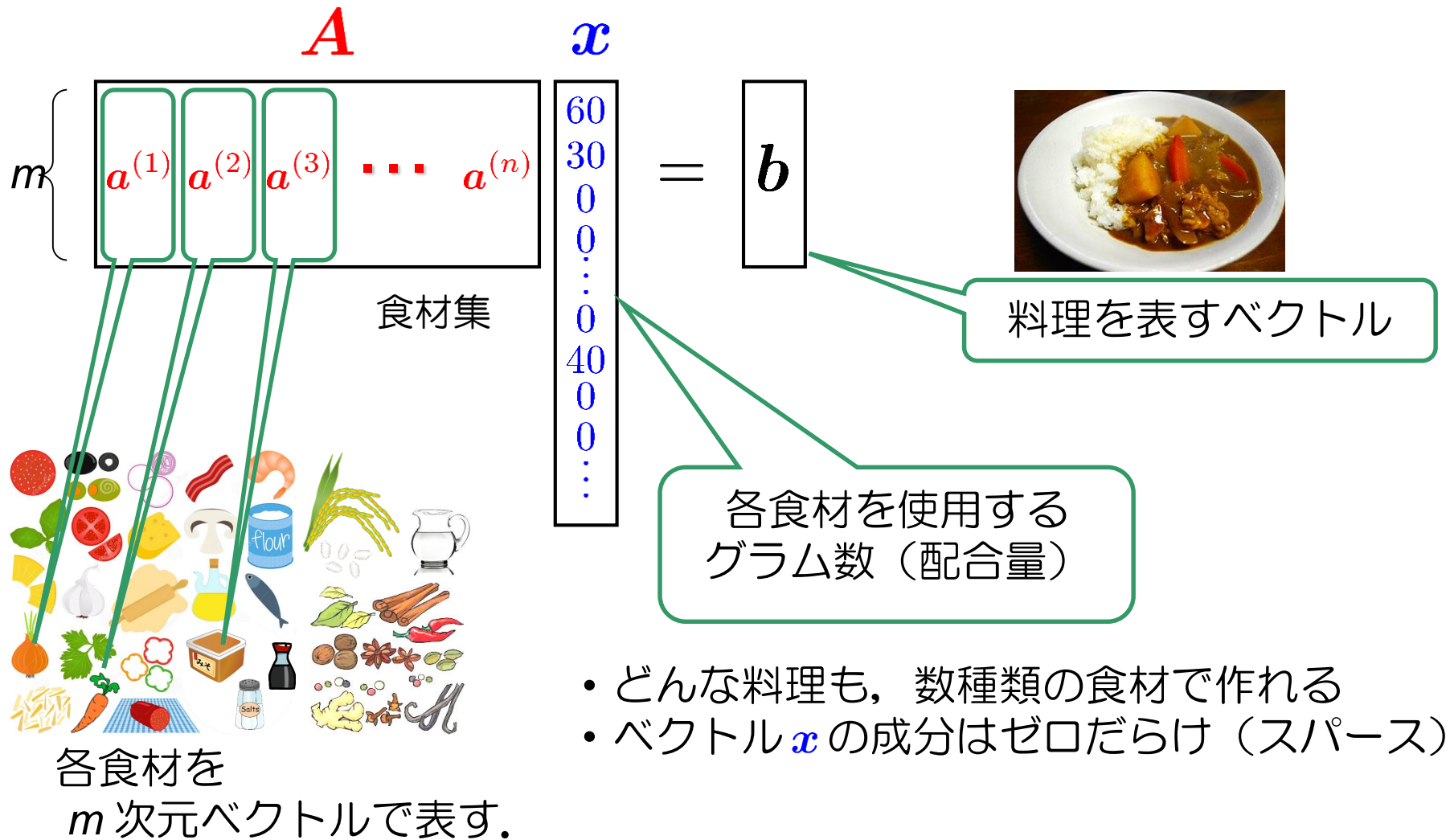
食材の線形結合



$$\begin{aligned}
 &60 \times \text{たまねぎ} + 30 \times \text{にんじん} + 80 \times \text{じゃがいも} + 40 \times \text{豚肉} \\
 &+ 2 \times \text{香辛料A} + \dots + 0.1 \times \text{香辛料X} + 10 \times \text{油} + 80 \times \text{水} + 120 \times \text{ごはん}
 \end{aligned}
 =$$



料理のスパースモデリング



連立一次方程式 = 配合量を求める問題

混合物 \mathbf{b} は,

- どの材料 (= ベクトル $\mathbf{a}^{(1)}, \mathbf{a}^{(2)}, \dots, \mathbf{a}^{(n)} \in \mathbb{R}^m$) が使われているか?
- それぞれの配合量 (= x_1, x_2, \dots, x_n) はいくらか?

$$x_1 \mathbf{a}^{(1)} + x_2 \mathbf{a}^{(2)} + \dots + x_n \mathbf{a}^{(n)} = \mathbf{b} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{a}^{(1)} \dots \mathbf{a}^{(n)}] \in \mathbb{R}^{m \times n}$$

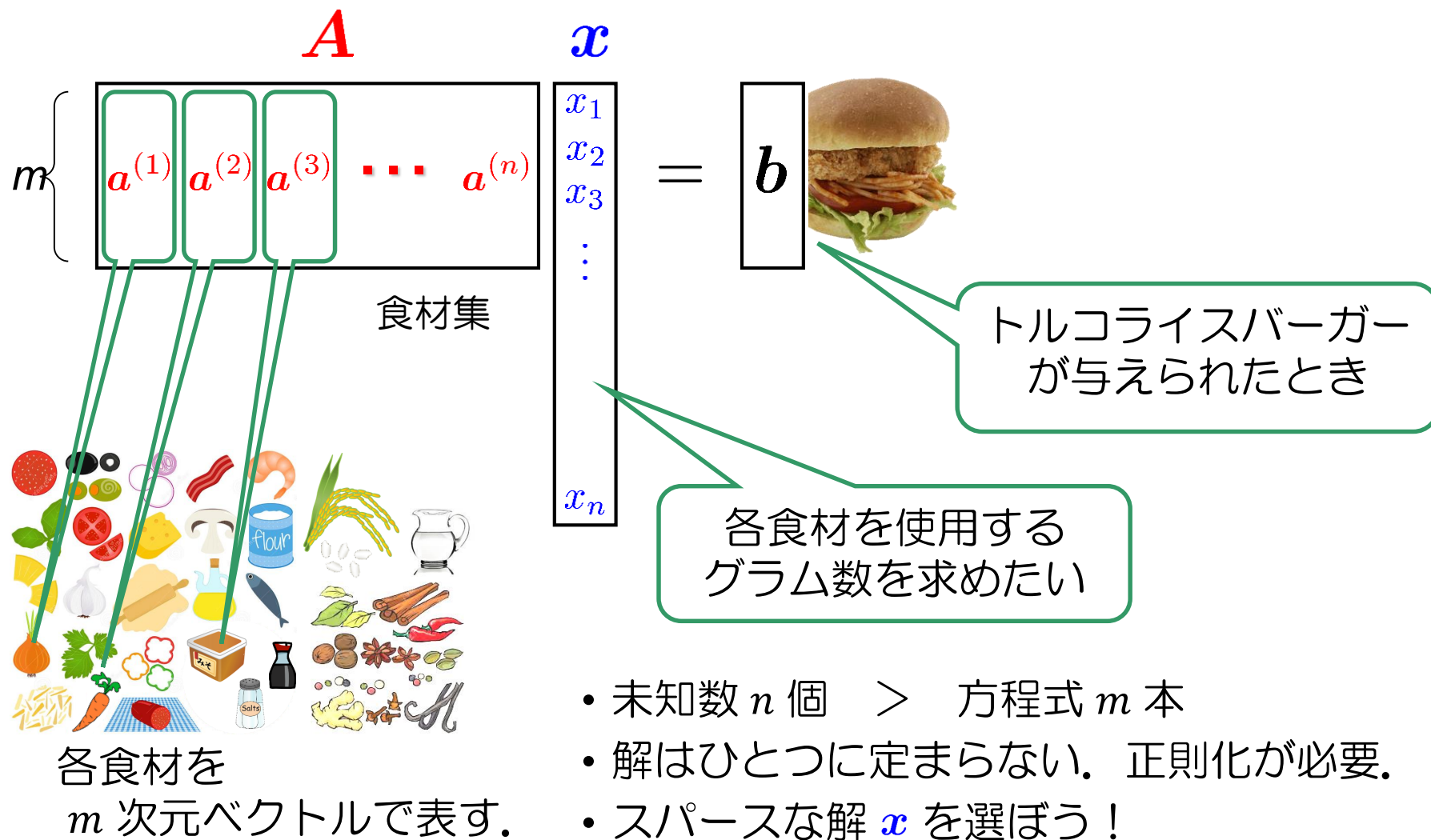
例:

$$x_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} + x_3 \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

問:料理の食材を求めよ



どの知識を選んで認識する？



誰？



どの知識を選んで認識する？



誰？



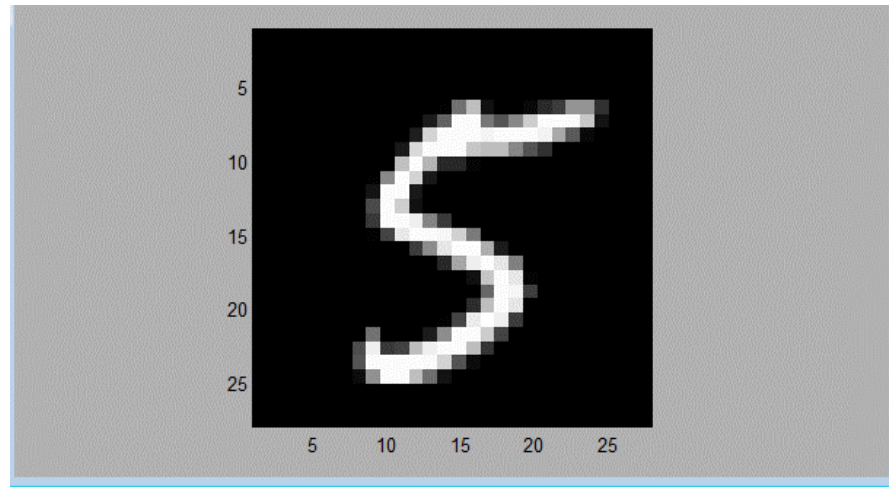
大量の知識の中から、
質問に対して簡潔な説明が作れる知識を選ぶ。

- 簡潔な説明＝厳選した少数の知識の組合せ



離散画像

コンピュータにとって、画像は数値の集まり

[illegible]

どの原料を選んで合成する？

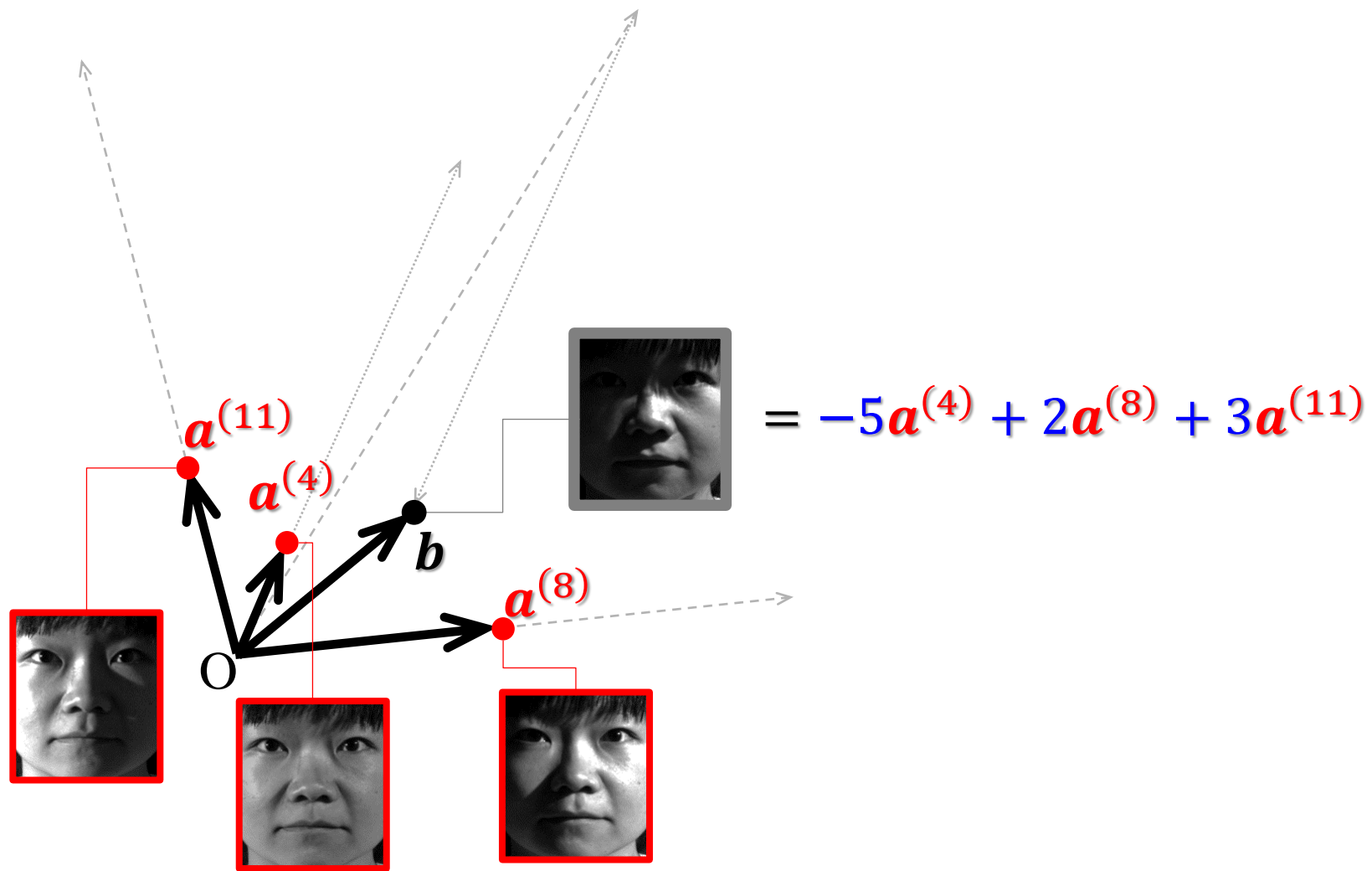


- 質問画像の合成

$$b = x_1 a^{(1)} + x_2 a^{(2)} + \cdots + x_n a^{(n)}$$

- 簡潔な説明＝使う画像の係数 x_j だけが非ゼロ
(疎, スパース(sparse))

画像の和とスカラ倍



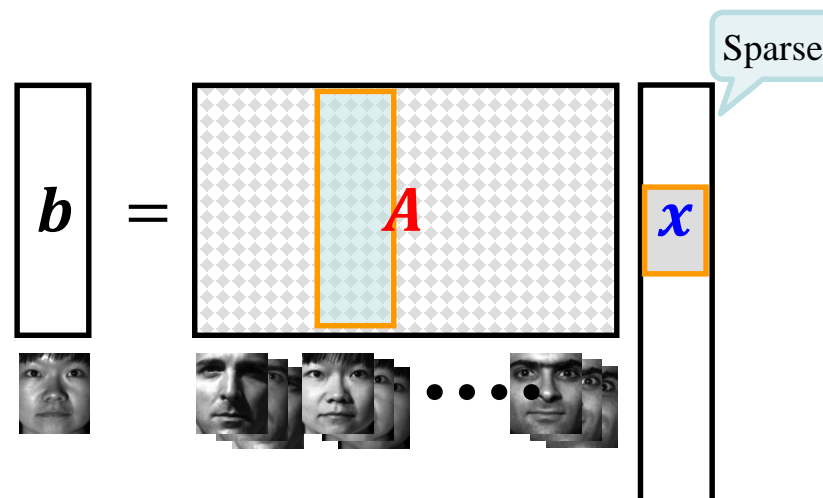
スパース表現に基づくパターン認識

[Wright+, 09]

データ \mathbf{b} を簡潔に合成できる少数の原料を特定する.

$$\mathbf{b} = x_1 \mathbf{a}^{(1)} + x_2 \mathbf{a}^{(2)} + \cdots + x_n \mathbf{a}^{(n)}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} & \mathbf{a}^{(2)} & \cdots & \mathbf{a}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$



どの原料を選んで合成する？



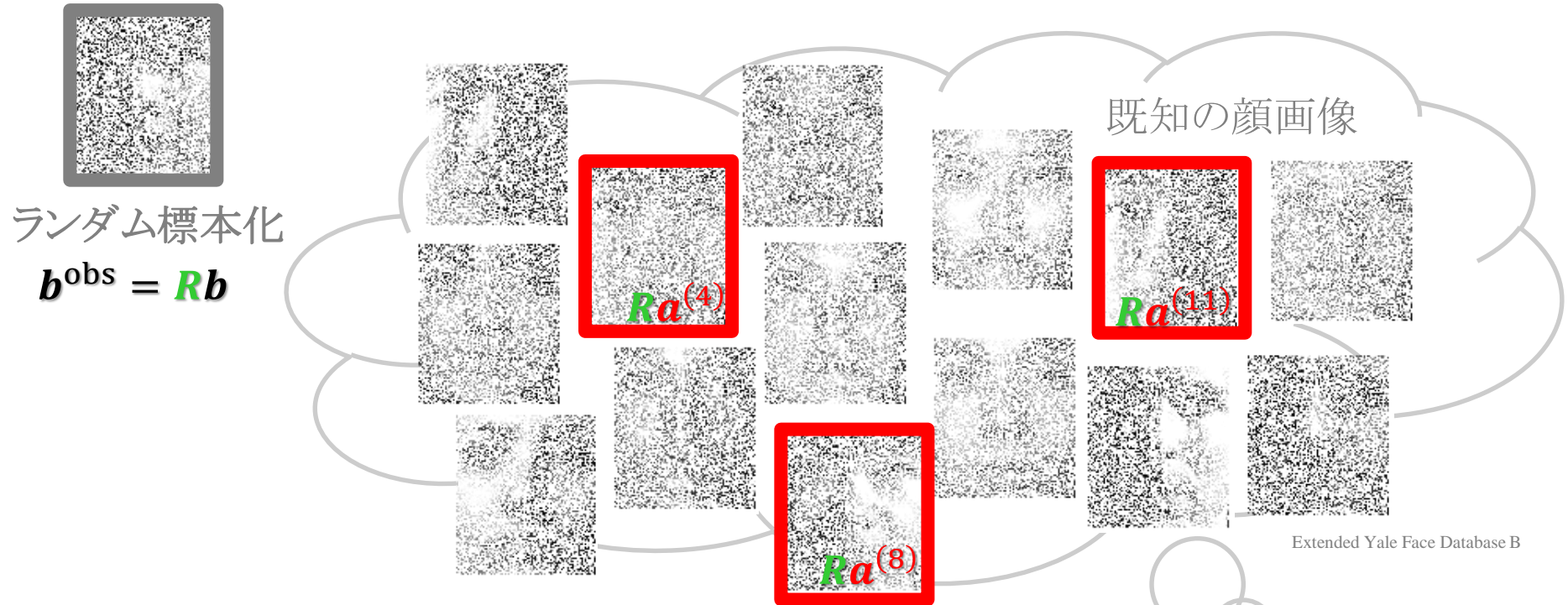
- 質問画像の合成

$$b = x_1 a^{(1)} + x_2 a^{(2)} + \dots + x_n a^{(n)}$$

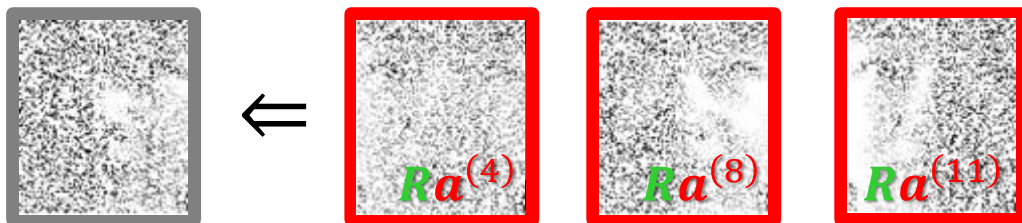
- 簡潔な説明＝使う画像の係数 x_j だけが非ゼロ
(疎, スパース(sparse))



観測が不完全でも認識できる



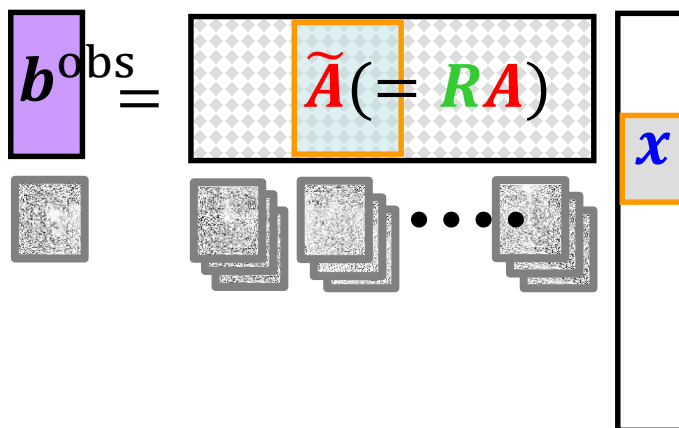
- 不完全な観測データ b^{obs} のスパース表現
- $b^{\text{obs}} = x_1 Ra^{(1)} + \dots + x_n Ra^{(n)} = \tilde{A}x \quad (\tilde{A} = RA)$
- Sparse



スパース表現に基づくパターン認識

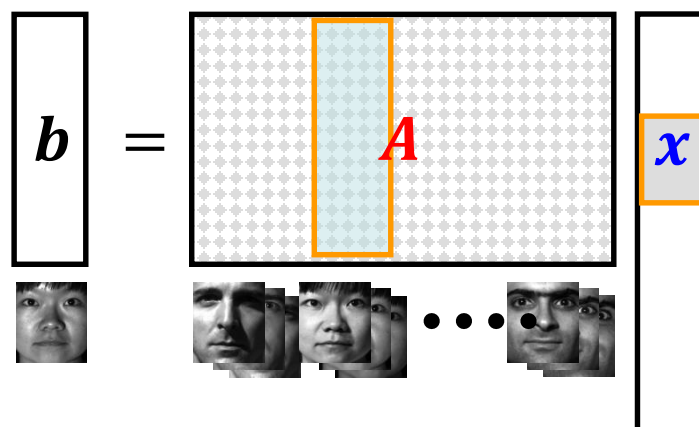
[Wright+, 09]

(1) 不完全なデータ \mathbf{b}^{obs}
を上手に取得する.



(2) 適切な辞書 (原料の集合)
を用いてスパース解 \mathbf{x} を求める.

Minimize $\|\mathbf{x}\|_0$ subject to $\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} \approx \tilde{\mathbf{b}}$

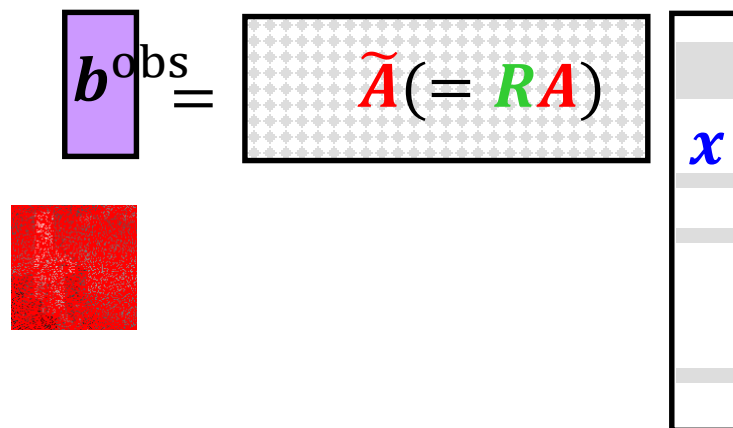


(3) 非ゼロ成分で判別できる.

圧縮センシング (compressed sensing)

[Donoho, 06] [Candes+, 06]

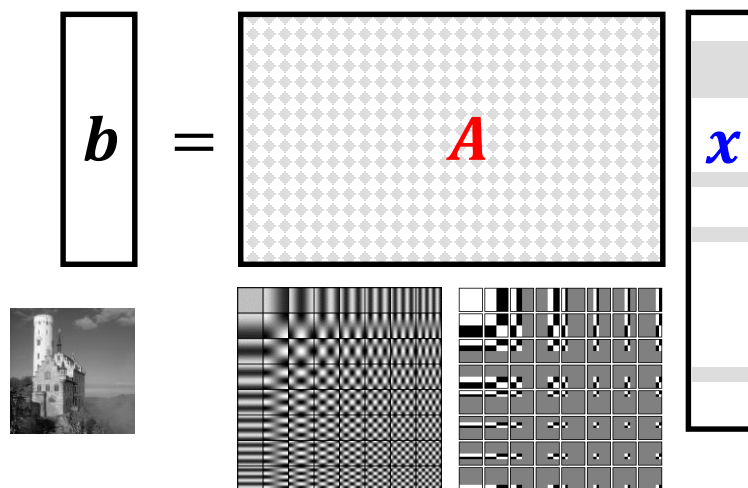
(1) 不完全なデータ \mathbf{b}^{obs}
を上手に取得する.



(2) 適切な辞書 (原料の集合)
を用いてスパース解 \mathbf{x} を求める.

Minimize $\|\mathbf{x}\|_1$ subject to $\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} \approx \tilde{\mathbf{b}}$

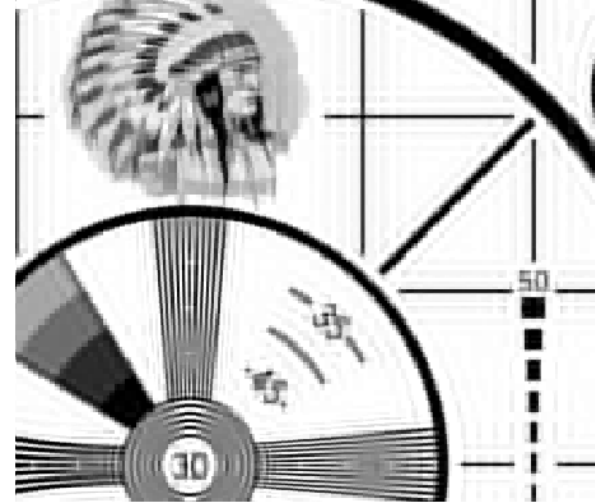
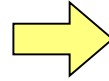
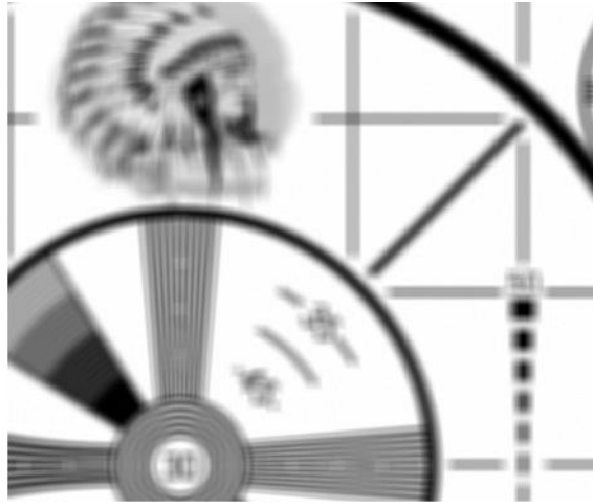
(3) 完全なデータ \mathbf{b} を再構成できる.



利点

- ✓ 計測の省力化
- ✓ データの高品位化
- ✓ 解析 (内訳から本質を見抜く)
- ✓ $+\alpha$

Deblurring / Superresolution



$$\tilde{b} = RAx = \tilde{A}x$$

$$b = Ax$$

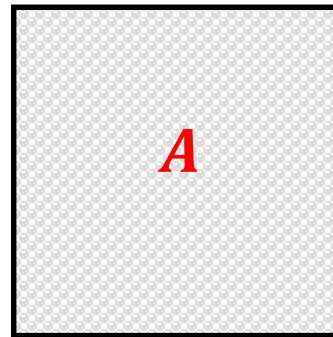
Low res. image

\tilde{b}

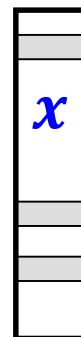
=



Blurring &
downsampling



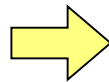
Wavelet⁻¹



Sparse wavelet coef.

Sparse

Image inpainting



$$\tilde{b} = RAx = \tilde{A}x$$

$$b = Ax$$

Known pixel values

$$\tilde{b}$$

=

$$R$$

Extraction of
normal pixel values

$$A$$

Wavelet⁻¹

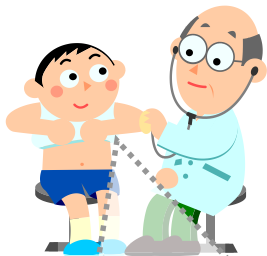
$$x$$

Sparse

Sparse wavelet coef.

Lung sound separation (crackles)

[Sakai+11]

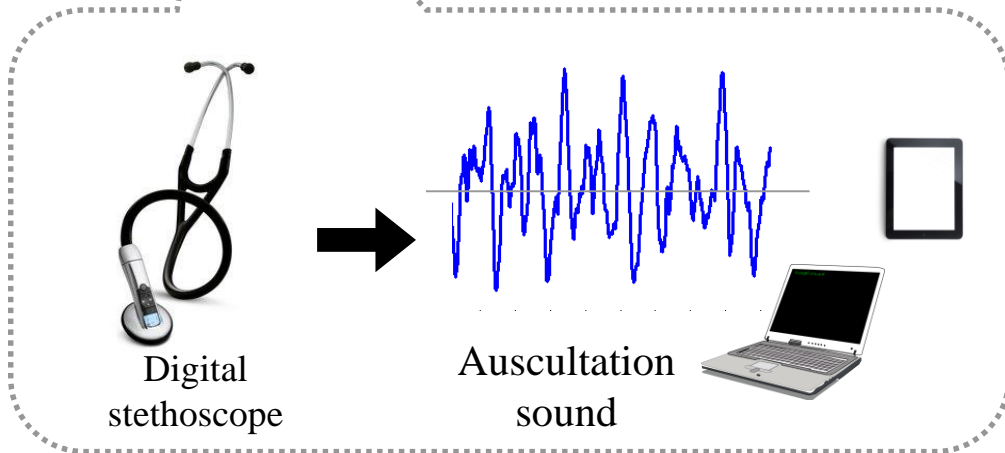
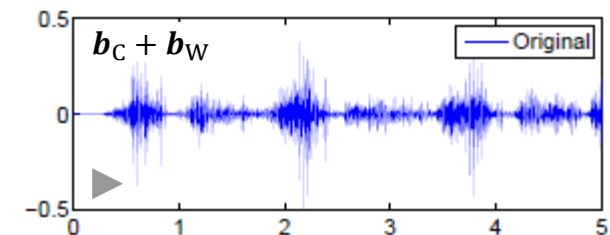
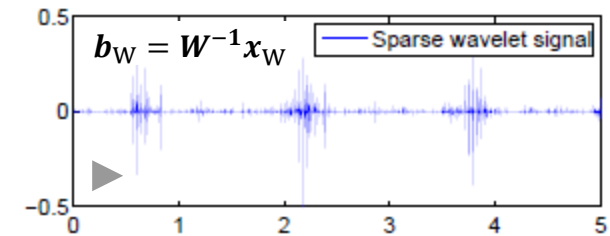
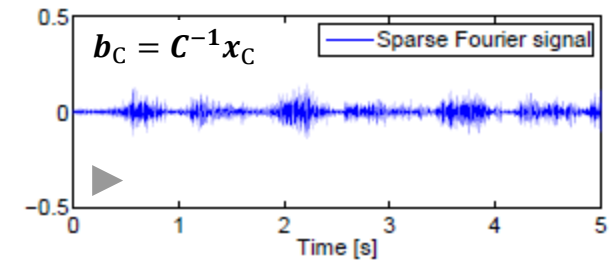
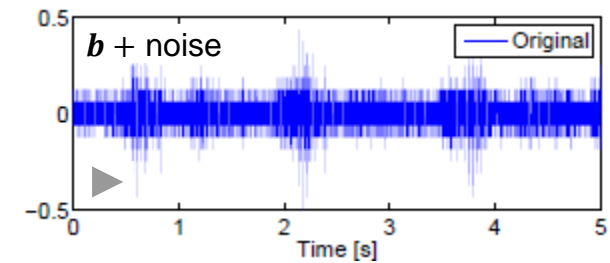


$$\mathbf{x}^* = \arg \min_x \frac{1}{2} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1$$

$$\mathbf{b} \approx \begin{bmatrix} \mathbf{C}^{-1} & \mathbf{W}^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{x}_C \\ \mathbf{x}_W \end{bmatrix}$$

Cos & Wavelet

sparse coeff.



劣決定問題のスプース正則化

Underdetermined Problem with Sparse Regularization

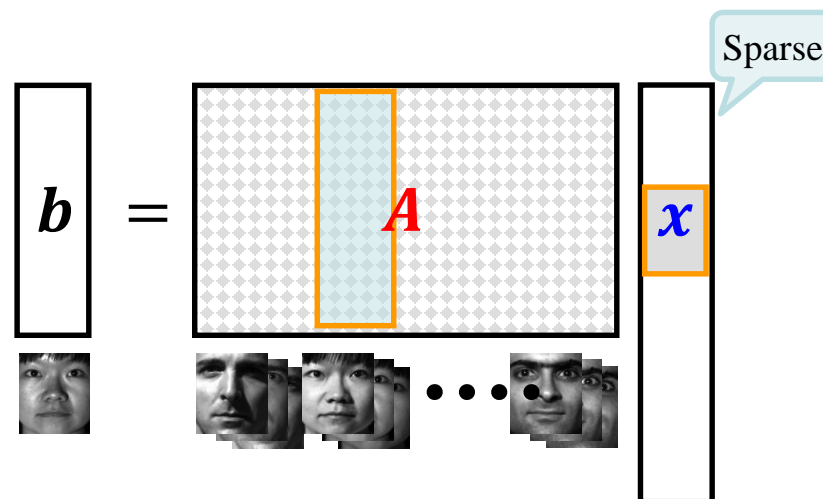
スパース表現に基づくパターン認識

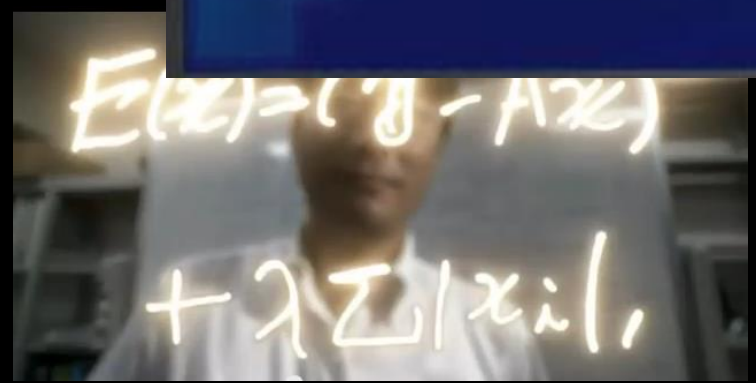
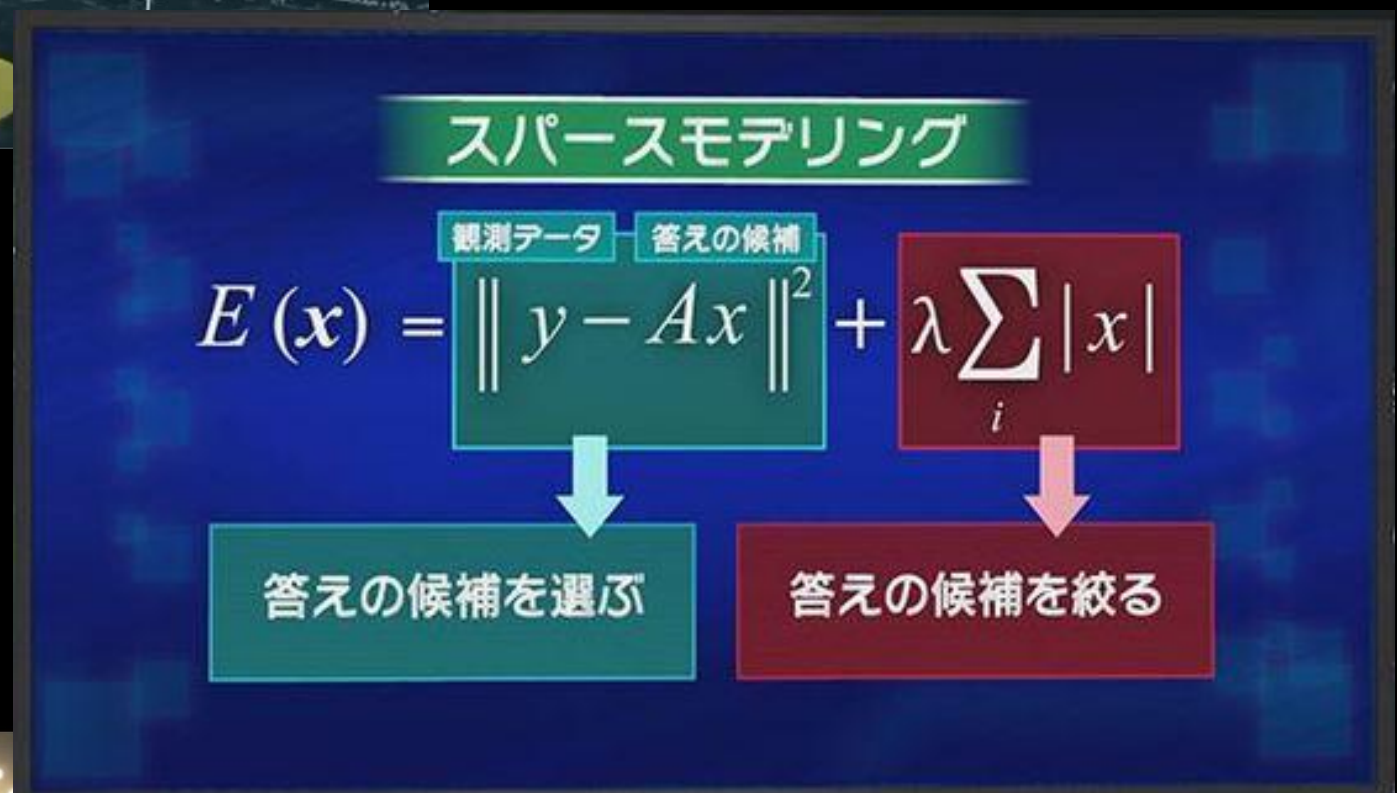
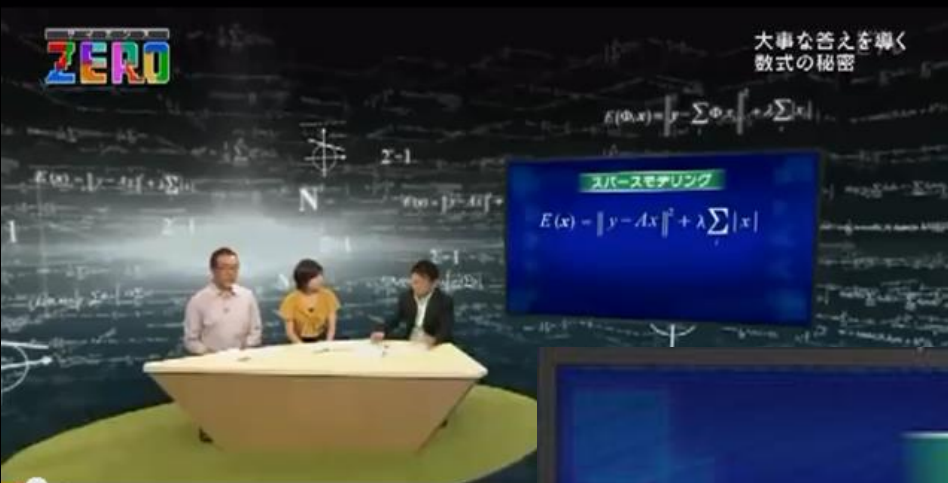
[Wright+, 09]

データ \mathbf{b} を簡潔に合成できる少数の原料を特定する.

$$\mathbf{b} = x_1 \mathbf{a}^{(1)} + x_2 \mathbf{a}^{(2)} + \cdots + x_n \mathbf{a}^{(n)}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{a}^{(1)} & \mathbf{a}^{(2)} & \cdots & \mathbf{a}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$





Sparse solution

- Problem statement with ℓ_0 norm

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

“Find the sparse solution \mathbf{x}^* , that satisfies $\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$, and has the smallest # of nonzeros”.

- Issues

- Uniqueness

Is the sparse solution unique? Aren't there two or more solutions with the same # of nonzeros?

- Under what conditions is the solution unique?
- How sparse should the solution be?



- Algorithm

Can we efficiently find the sparse solution? Finding nonzeros seems to be combinatorial.



スパース解が一意に求まる条件

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

スパースなベクトルに対して $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ が直交行列に似た性質をもっていれば,

□ ただひとつの ℓ_0 最小解がある.

□ 下記の ℓ_1 最小解と等しい.

$$\mathbf{x}^* = \arg \min_{\mathbf{x}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

✓ 直交行列に似た性質

- 制限等長性 (RIP) [Candes&Tao, 06] \Leftrightarrow 任意の k スパースベクトルに関する JL 変換

$$(1 - \delta_s) \|\mathbf{c}\|_2^2 \leq \|\mathbf{Ac}\|_2^2 \leq (1 + \delta_s) \|\mathbf{c}\|_2^2 \quad \forall \mathbf{c} \in \{\mathbf{x} \mid \|\mathbf{x}\|_0 \leq k\}$$

- 相互コヒーレンス [Donoho&Elad, 03] [Gribonval&Nielsen, 03] \Leftrightarrow 原料の近似的な直交性

$$\|\mathbf{x}\|_0 \leq \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{\mu} \right), \quad \mu = \max_{i,j} \frac{|\mathbf{a}^{(i)\top} \mathbf{a}^{(j)}|}{\|\mathbf{a}^{(i)}\| \|\mathbf{a}^{(j)}\|} = \max_{i,j} |\cos \theta_{ij}|$$

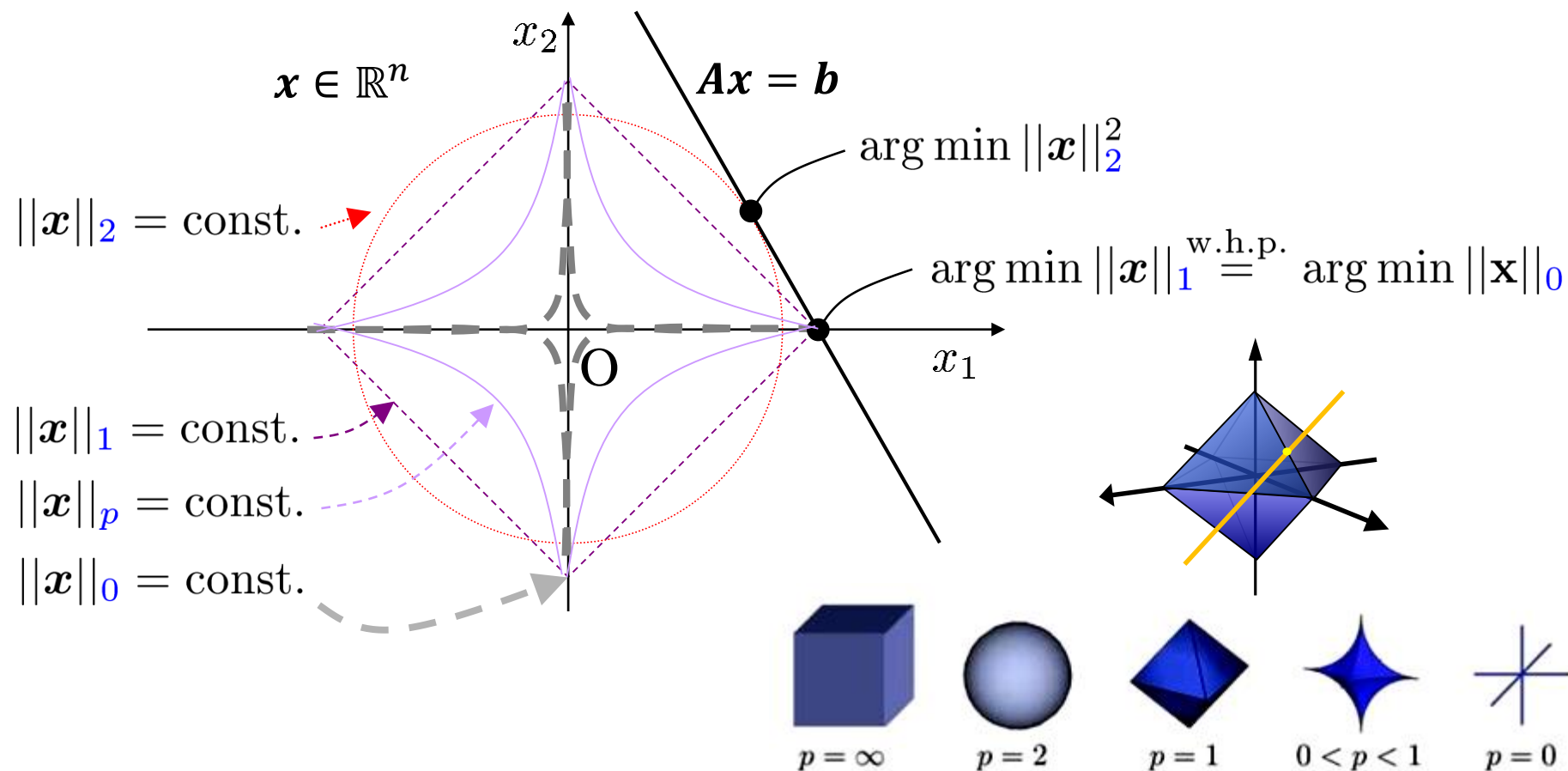
✓ $m = \Omega(k \log n)$ 個の計測データをもつ \mathbf{b} から k スパース解 ($\|\mathbf{x}\|_0 \leq k$) が求まる.

✓ 制約条件を $\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2 \leq \delta$ とすると, ノイズを含むデータ \mathbf{b} をスパース近似できる.

ℓ_0 - ℓ_1 等価性の直観的な図解

Minimize $\|\mathbf{x}\|_p^p$ subject to $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$

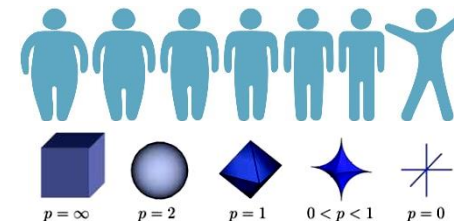
$$\|\mathbf{x}\|_p^p = |x_1|^p + \dots + |x_n|^p$$



スパース解をもつ凸緩和問題

- BP: Basis pursuit

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{Minimize}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{subject to} \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$



- BP_δ : Constrained BP denoising

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{Minimize}} \|\mathbf{x}\|_1 \quad \text{subject to} \quad \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2 \leq \delta$$

- LASSO: least absolute shrinkage and selection operator

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{Minimize}} \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2 \quad \text{subject to} \quad \|\mathbf{x}\|_1 \leq \tau$$

- LASSO regression / unconstrained BP denoising (BPDN) / ℓ_1 -regularized least squares (ℓ_1 -LS)

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{Minimize}} \frac{1}{2} \|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{x}\|_1$$

なぜランダム射影で維持できるのか？

□ 直交行列 $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$

✓ 正規直交性
 $Q^\top Q = I$

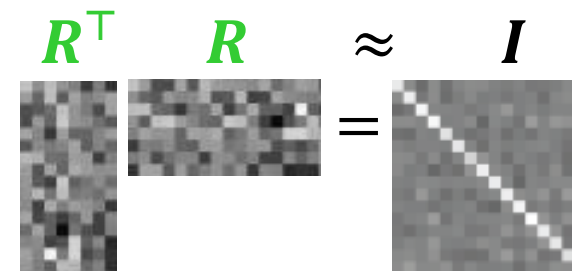
✓ ℓ_2 ノルムの不変性
 $\|Qx\|_2^2 = \|x\|_2^2$

✓ 可逆性
 $Q^\top(Qx) = x$

□ ランダム行列 $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$

(R_{ij} : iid Gaussian with mean zero and variance $1/m$)

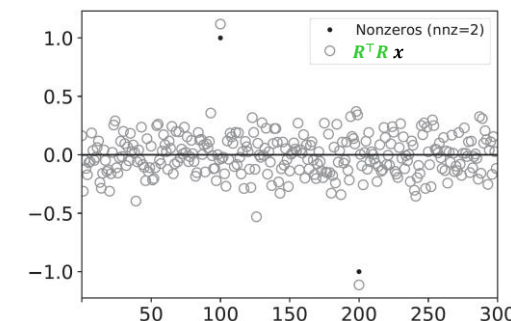
✓ 近似的な正規直交性
(mutual incoherence)

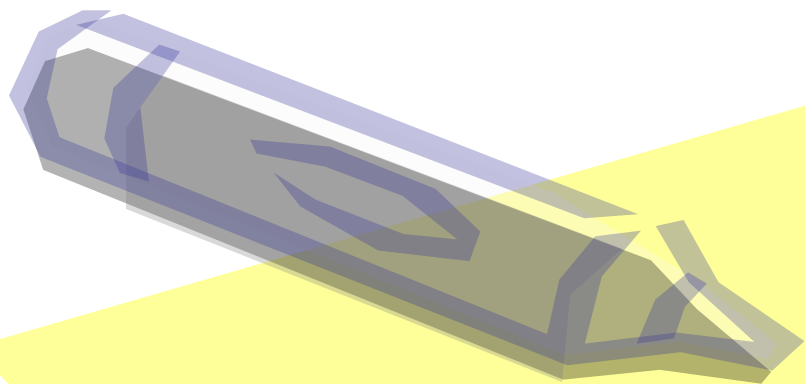
$$R^\top R \approx I$$


✓ 近似的な ℓ_2 ノルムの不変性 (JL 変換)
 $(1 - \varepsilon)\|x\|_2^2 \leq \|Rx\|_2^2 \leq (1 + \varepsilon)\|x\|_2^2$

✓ 近似的な可逆性
(スパースベクトルに限る)

$$x = [0, 0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0, -1, 0, \dots, 0]^\top$$
$$x^{\text{est}} = R^\top R x$$





今日は
ここまで

