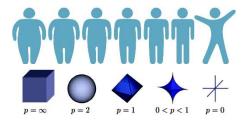
Day 4

スパース解をもつ凸緩和問題

■ BP: Basis pursuit

Minimize
$$||x||_1$$
 subject to $Ax = b$



 \blacksquare BP $_{\delta}$: Constrained BP denoising

Minimize
$$||x||_1$$
 subject to $||b - Ax||_2 \le \delta$

■ LASSO: least absolute shrinkage and selection operator

Minimize
$$\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2$$
 subject to $\|\boldsymbol{x}\|_1 \le \tau$

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

Minimize
$$\frac{1}{2} || \boldsymbol{b} - A \boldsymbol{x} ||_{2}^{2} + \lambda || \boldsymbol{x} ||_{1}$$

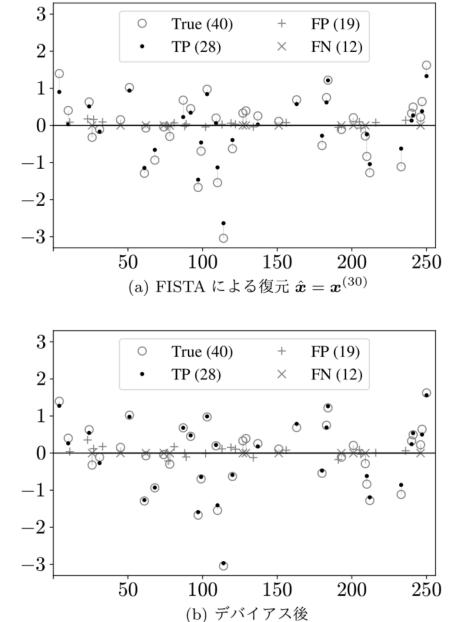


図 3.22 正規乱数の非ゼロ成分をもつスパース解を FISTA で復元した例. True は正解 $\boldsymbol{x}^{\circ} \in \mathbb{R}^{256}$ の非ゼロ成分である。正答 TP、誤検出 FP、検出漏れ FN の意味は図 3.8 を参照のこと。

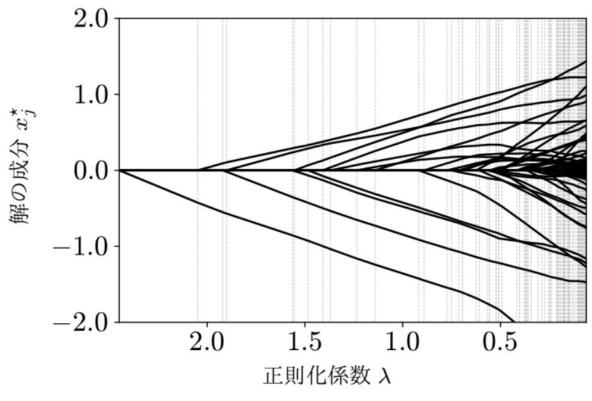


図 **3.15** 解パスの例. 非ゼロ成分の数と値は λ に依存する.

$$\lambda = \sigma_{\nu} \sqrt{2 \log n} \approx 0.16$$

例 3.9
$$m=1$$
, $n=2$, $\mathbf{A}=\begin{bmatrix} 1 & 0.5 \end{bmatrix}$, $b=2.3$ とする.

• LASSO 回帰の目的関数

$$F_{\lambda}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} (2.3 - (x_1 + 0.5x_2))^2 + \lambda(|x_1| + |x_2|)$$

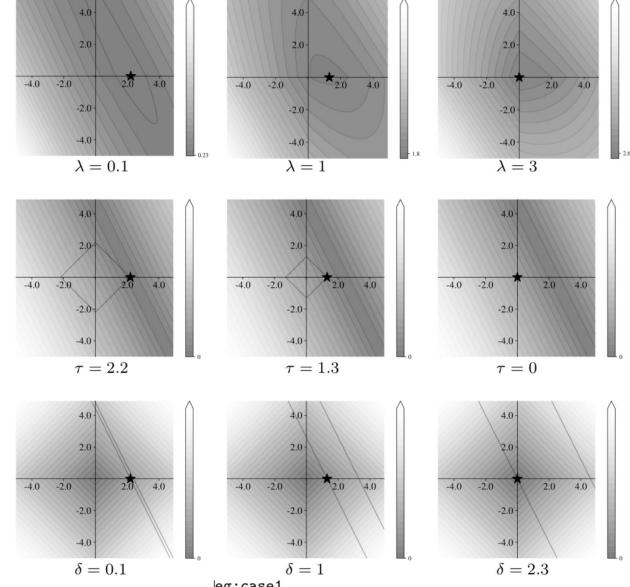
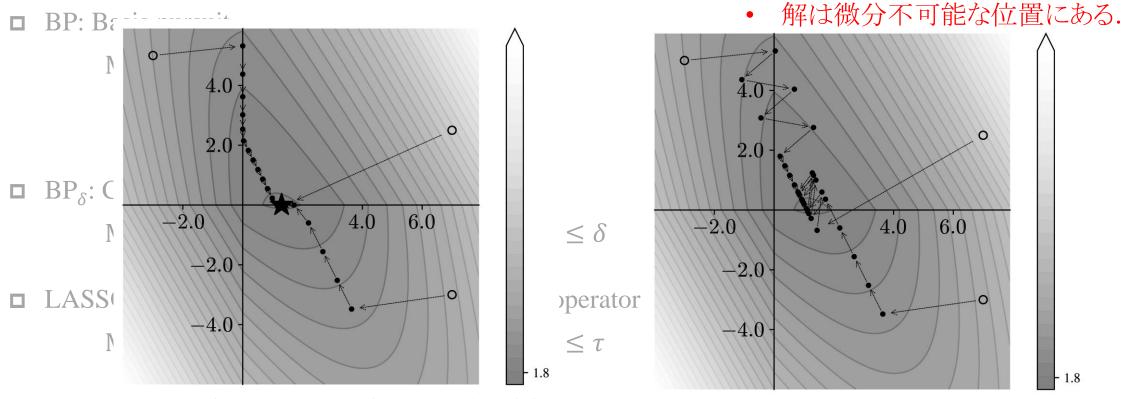


図 3.13 例 $^{\log : \operatorname{case 1}}_{3.9}$ ($m=1,\ n=2$) の図解. 横軸を x_1 , 縦軸を x_2 として図示している. 等高線と \star は,上段:LASSO 回帰,中段:LASSO,下段: BP_δ の目的関数と解を表す.中段の正方形および下段の平行線は,それぞれ LASSO と BP_δ の制約条件が表す領域の境界である.

スパース解をもつ凸緩和問題



勾配を使うと, 止まれない.

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

Minimize
$$\frac{1}{2} || \boldsymbol{b} - A \boldsymbol{x} ||_2^2 + \lambda || \boldsymbol{x} ||_1$$

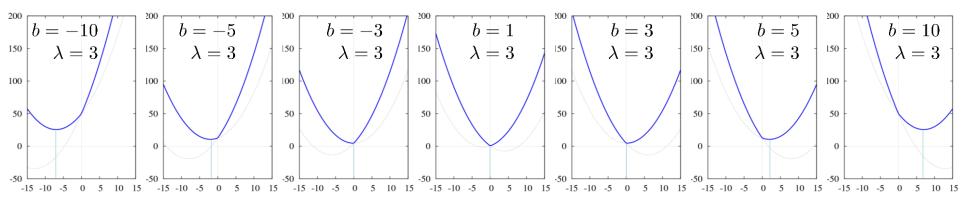
Soft thresholding/shrinkage

$$x^* = \arg\min_{x} \frac{1}{2} ||\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}||_2^2 + \lambda ||\boldsymbol{x}||_1 = \operatorname{soft}(\boldsymbol{b}, \lambda) \text{ if } \boldsymbol{A} = \boldsymbol{I} \text{ (identity)}.$$

$$x_j^* = \arg\min_{x_j} \left(\frac{1}{2} (b_j - x_j)^2 + \lambda |x_j|\right) = \begin{cases} b_j - \lambda & (0 < \lambda < b_j) \\ 0 & (-\lambda \le b_j \le \lambda) \\ b_j + \lambda & (b_j < -\lambda < 0) \end{cases}$$

shrink each b_i by λ

$$f_{b,\lambda}(x) = \frac{1}{2}(b-x)^2 + \lambda |x|$$



$$\arg\min_{x} f_{b,\lambda}(x) = \operatorname{soft}(b,\lambda) = \operatorname{sign}(b) \max(|b| - \lambda, 0)$$

IST

$$x^* = \arg\min_{x} \frac{1}{2} || b - Ax ||_2^2 + \lambda ||x||_1$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} \coloneqq \operatorname{soft}\left(\mathbf{x}^{(k)} + \frac{1}{L}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}), \frac{\lambda}{L}\right)$$

- The constant L must be larger than the maximum eigenvalue of A^TA .
- $\bullet \quad \|\mathbf{x}^{(k)} \mathbf{x}^{\star}\| = \mathcal{O}(1/k)$
- IST can be derived from locally approximating the objective function with $A^T A \approx LI$.
- a.k.a. the proximal gradient method.

Ex.
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

 $\lambda = 0.1, \ L = 5, \ \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{A}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$

```
\begin{bmatrix} 2.00 & -3.00 & -4.00 & -1.00 & -1.00 \end{bmatrix}
[2.32 -0.97 -0.72 0.19 -0.50]
\begin{bmatrix} 2.41 & -0.78 & -0.56 & 0.23 & -0.39 \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} 2.47 & -0.67 & -0.60 \end{bmatrix}
                                0. 19 -0. 33]'
          -0.57 -0.65
                                0.15 - 0.28
[2.52]
\begin{bmatrix} 2.57 & -0.47 & -0.70 \end{bmatrix}
                                0.10 -0.237
\begin{bmatrix} 2.62 & -0.37 & -0.75 \end{bmatrix}
                                 0.05 -0.18]
[2.67]
          -0.27 -0.80
                                 0.00 -0.13]
\begin{bmatrix} 2.73 & -0.19 & -0.85 \end{bmatrix}
                                 0.00 -0.07
[2.77]
          -0.13 -0.89
                                 0.00 -0.03
\begin{bmatrix} 2.81 & -0.07 & -0.93 \end{bmatrix}
                                 0.00 -0.00]
[3.00]
            0.00 - 1.00
                                           0.007
                                0.00
```

FISTA

$$x^* = \arg\min_{x} \frac{1}{2} ||b - Ax||_2^2 + \lambda ||x||_1$$

$$\mathbf{w}^{(1)} \coloneqq \mathbf{x}^{(0)}, \quad t_1 \coloneqq 1$$

$$\mathbf{x}^{(k)} \coloneqq \operatorname{soft}\left(\mathbf{w}^{(k)} + \frac{1}{L}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}(\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{w}^{(k)}), \frac{\lambda}{L}\right)$$

$$t_{k+1} \coloneqq \frac{1}{2}\left(1 + \sqrt{1 + 4t_k^2}\right)$$

$$\mathbf{w}^{(k+1)} \coloneqq \mathbf{x}^{(k)} + \frac{t_k - 1}{t_{k+1}}(\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)})$$

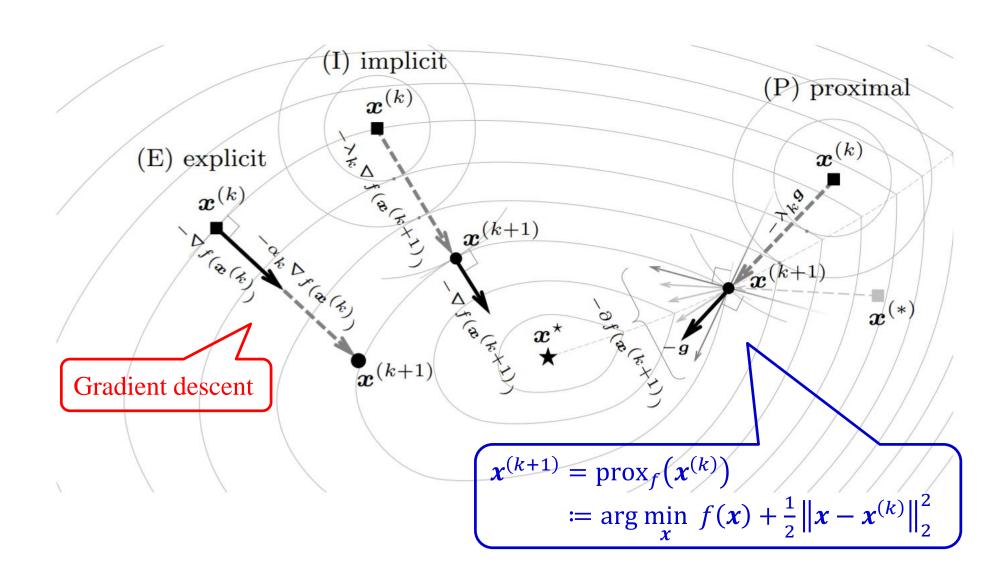
- $||x^{(k)} x^*|| = \mathcal{O}(1/k^2)$
- IST with the Nesterov acceleration

Ex.
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

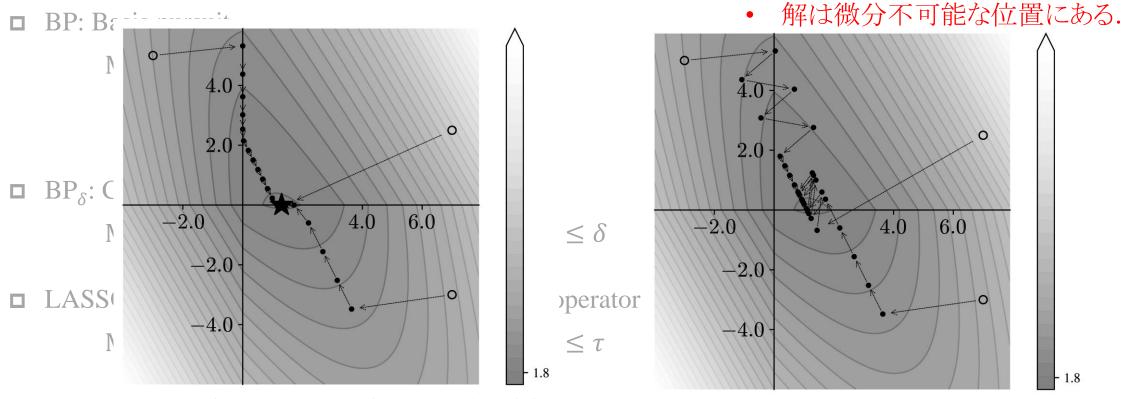
 $\lambda = 0.1, L = 10, \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{A}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$

$$\cdots$$
 [3.00 0.00 -1.00 0.00 0.00]

近接点法 = 陰的(劣)勾配降下法



スパース解をもつ凸緩和問題



勾配を使うと, 止まれない.

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

Minimize
$$\frac{1}{2} || \boldsymbol{b} - A \boldsymbol{x} ||_2^2 + \lambda || \boldsymbol{x} ||_1$$

近接写像の反復法

- ロ 凸最小化問題 Minimize $f_1(x) + f_2(x) + \cdots + f_n(x)$ $x \in \mathbb{R}^{d_x}$ f_1, \ldots, f_n は凸関数で、そのいくつかは微分不可能
- □ 近接作用素

$$\operatorname{prox}_{f}(q) = \arg\min_{x} |f(x)| + \frac{1}{2} ||x - q||_{2}^{2}$$

近似解の更新に使う

- $x^{(k+1)} = \text{prox}_f(x^{(k)}) \iff f(x^{(k+1)}) \le f(x^{(k)}) \quad \because -(x^{(k+1)} x^{(k)}) \in \partial f(x^{(k+1)})$ 劣勾配降下
- 最小解 x^* は不動点: $x^* = \operatorname{prox}_f(x^*) = \arg\min_{x} f(x)$.
- □ 算法
 - 反復ソフト閾値処理(ISTA)/ alternating projections / averaged projections / ADMM, etc.

近接作用素の例

$$\operatorname{prox}_{f}(q) = \arg\min_{x} f(x) + \frac{1}{2} ||x - q||_{2}^{2}$$

ロ ℓ_p ノルムのp乗: $f(\mathbf{x}) = \lambda \|\mathbf{x}\|_p^p$

•
$$p = 2$$
: $\operatorname{prox}_{\lambda \| \cdot \|_{2}^{2}}(q) = q/(2\lambda + 1)$

q を縮小する処理

•
$$p = 1$$
: $\operatorname{prox}_{\lambda \| \cdot \|}(q) = \operatorname{soft}(q, \lambda)$

q の各成分を λ だけ切り詰める処理

- ロ 核ノルム $\|A\|_* = (行列Aの特異値 \kappa = [\kappa_1, ..., \kappa_r]^\mathsf{T}$ の和) $= \|\kappa\|_1$ ただし $A = U \operatorname{diag}(\kappa) V^\mathsf{T}$ A の低ランク性(行または列の線形従属性)を表す凸関数
 - $f(x) = \lambda ||A||_*$ $\operatorname{prox}_{\lambda ||\cdot||_*}(A) = U \operatorname{diag}(\operatorname{soft}(\kappa, \lambda)) V^{\top} := \operatorname{svt}(A, \lambda)$ (singular value thresholding)
- 口 指示関数 $\iota_{\mathcal{C}}(x) = \begin{cases} 0 & \text{if } x \in \mathcal{C} \\ \infty & \text{otherwise} \end{cases}$ 制約条件を満たすか否かを表す凸関数

•
$$C_{c,\varepsilon} = \{x \mid ||x - c||_2 \le \varepsilon\}$$
: $\operatorname{prox}_{l_{C_{c,\varepsilon}}}(q) = c + \varepsilon \frac{q - c}{||q - c||_2}$

•
$$C_{A,b} = \{x \mid Ax = b\}$$
: $\text{prox}_{C_{A,b}}(q) = (I - A^{\top}(AA^{\top})^{-1}A)q + A^{\top}(AA^{\top})^{-1}b$

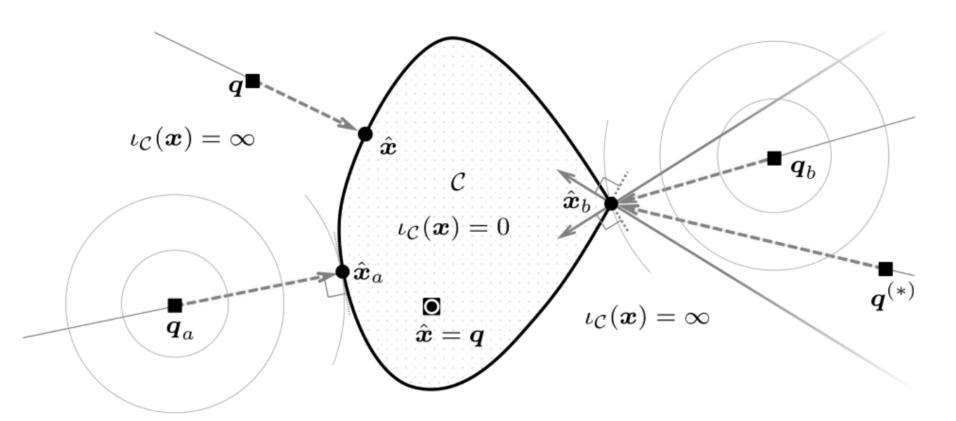


図 **4.3** 閉凸集合 C の標示関数 ι_C と C への近接写像. C の外部の点 $\mathbf{q} \notin C$ の近接点 $\hat{\mathbf{x}}$ は, \mathbf{q} から最寄りの C の境界に位置する.

$$\operatorname{prox}_{\iota_{\mathcal{C}}}(\boldsymbol{q}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{x}} \iota_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_{2}^{2}$$
$$= \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{C}} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_{2}$$

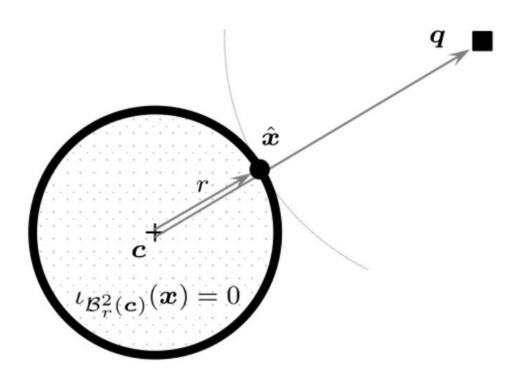


図 4.7 閉 ℓ_2 超球体 $\mathcal{B}_r^2(\mathbf{c})$ への近接写像. 閉 ℓ_2 超球体外部の点 $\mathbf{q} \notin \mathcal{B}_r^2(\mathbf{c})$ の近接点 $\hat{\mathbf{x}}$ は、中心 \mathbf{c} から $\mathbf{q} - \mathbf{c}$ の方向に距離 r だけ移動した超球面 $\partial \mathcal{B}_r^2(\mathbf{c})$ の上に位置する.

$$\operatorname{prox}_{\iota_{\mathcal{C}}}(\boldsymbol{q}) = \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{x}} \iota_{\mathcal{C}}(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_{2}^{2}$$
$$= \operatorname*{arg\,min}_{\boldsymbol{x} \in \mathcal{C}} \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{q}\|_{2}$$

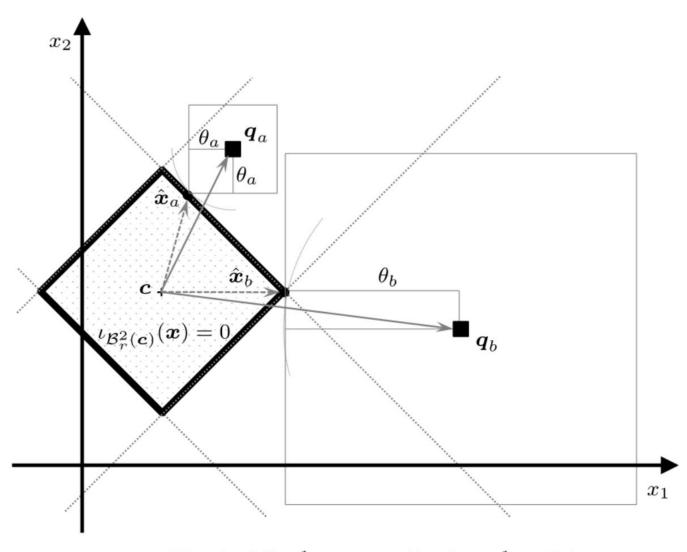


図 4.8 閉 ℓ_1 超球体 $\mathcal{B}_r^1(\mathbf{c})$ への近接写像. $\mathcal{B}_r^1(\mathbf{c})$ 外部の点 \mathbf{q}_a と \mathbf{q}_b の近接点はそれぞれ $\hat{\mathbf{x}}_a = \mathbf{c} + \operatorname{soft}(\mathbf{q}_a - \mathbf{c}, \theta_a)$, $\hat{\mathbf{x}}_b = \mathbf{c} + \operatorname{soft}(\mathbf{q}_b - \mathbf{c}, \theta_b)$ である.

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \operatorname{prox}_{\iota_{\mathcal{B}_r^1(\boldsymbol{c})}}(\boldsymbol{q}) = \boldsymbol{c} + \operatorname{soft}(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{c}, \theta)$$

 $\theta \leftarrow \text{FindThresh}(\boldsymbol{q} - \boldsymbol{c}, r)$

アルゴリズム 11 正軸体へ近接写像するための閾値(並べ替え法) $^{126)}$: $\theta \leftarrow$

FINDTHRESHS(\boldsymbol{v}, r)

入力: $\mathbf{v} = [v_1, \dots, v_n]^{\top} \in \mathbb{R}^n$, 正軸体の半径 $r \geq 0$;

出力: θ : 閾値:

1 v の成分の絶対値を降順に並べたものを u_1, \ldots, u_n とする;

2 $K \leftarrow \max_{k \in \{1,...,n\}} \{k \mid (\sum_{j=1}^{k} u_j - r)/k < u_k\}$: 不等式を満たす最大の k を K とする;

 $\theta = (\sum_{j=1}^{K} u_j - r)/K;$

アルゴリズム 12 正軸体へ近接写像するための閾値 $(アクティブセット法)^{127}$:

 $\theta \leftarrow \text{FINDTHRESHA}(\boldsymbol{v}, r)$

入力: $\boldsymbol{v} = [v_1, \dots, v_n]^{\top} \in \mathbb{R}^n$, 正軸体の半径 $r \geq 0$;

出力: θ : 閾値;

1 台の初期値を T ← $\{1, ..., n\}$ とする;

2 初期値 $\theta \leftarrow (\|\boldsymbol{v}\|_1 - r)/n$ を計算する;

 $3 \quad k \leftarrow 0;$

4 while $|\mathcal{T}| \neq k$ do

 $5 \qquad k \leftarrow |\mathcal{T}|;$

6 $T \leftarrow \{j \mid |v_j| > \theta, j \in T\}$: 閾値 θ を超える v の成分の番号を集合 T に残す;

v の台 T の成分のみから $\theta \leftarrow (||v_T||_1 - r)/|T|$ を計算する;

8 end while

Proximal gradient and IST

 $\underset{\mathbf{x}}{\text{Minimize }} f(\mathbf{x}) + g(\mathbf{x}) \quad \text{for smooth } f$

$$x^{(k+1)} = \operatorname{prox}_{\gamma g}(x^{(k)} - \gamma \nabla f(x^{(k)}))$$

$$= \operatorname{arg min}_{x} \gamma \left(g(x) + \frac{1}{2\gamma} \|x - (x^{(k)} - \gamma \nabla f(x^{(k)})\|_{2}^{2}\right)$$

$$= \operatorname{arg min}_{x} \left(g(x) + \nabla f(x^{(k)})^{\mathsf{T}} (x - x^{(k)}) + \frac{1}{2\gamma} \|x - x^{(k)}\|_{2}^{2} + \frac{1}{2\gamma} \|\nabla f(x^{(k)})\|_{2}^{2} + f(x^{(k)})\right)$$

$$= \operatorname{arg min}_{x} \left(g(x) + f(x^{(k)}) + \nabla f(x^{(k)})^{\mathsf{T}} (x - x^{(k)}) + \frac{1}{2\gamma} \|x - x^{(k)}\|_{2}^{2}\right)$$

- $x^{(k+1)}$ minimizes g(x) plus the 2nd order Taylor approximation of f(x) around $x^{(k)}$.
- If $g(\mathbf{x}) = \lambda ||\mathbf{x}||_1$, we have IST: $\mathbf{x}^{(k+1)} = \operatorname{soft}(\mathbf{x}^{(k)} \gamma \nabla f(\mathbf{x}^{(k)}), \gamma \lambda)$.
 - Special case: linear model fitting, ℓ_2 loss $f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} ||\mathbf{b} \mathbf{A}\mathbf{x}||_2^2$ and $\gamma = \frac{1}{L}$; $\mathbf{x}^{(k+1)} = \operatorname{soft}\left(\mathbf{x}^{(k)} + \frac{1}{L}\mathbf{A}^{\mathsf{T}}\left(\mathbf{b} \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}\right), \frac{\lambda}{L}\right)$

ADMM

Alternating direction method of multipliers [Gabay&Mercier, 76]

Minimize
$$f(x) + g(z)$$
 subject to $z = Gx$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} \coloneqq \arg\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) + \frac{\rho}{2} \left\| \boldsymbol{G} \boldsymbol{x} - (\boldsymbol{z}^{(k)} - \boldsymbol{u}^{(k)}) \right\|_{2}^{2}$$

$$\boldsymbol{z}^{(k+1)} \coloneqq \arg\min_{\boldsymbol{z}} g(\boldsymbol{z}) + \frac{\rho}{2} \left\| \boldsymbol{z} - (\boldsymbol{G} \boldsymbol{x}^{(k+1)} + \boldsymbol{u}^{(k)}) \right\|_{2}^{2}$$

$$\boldsymbol{u}^{(k+1)} \coloneqq \boldsymbol{u}^{(k)} + \boldsymbol{G} \boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{z}^{(k+1)}$$

SALSA

$$x^* = \arg\min_{x} \frac{1}{2} || b - Ax ||_2^2 + \lambda ||x||_1$$

$$v \coloneqq \operatorname{soft}\left(x^{(k)} + y^{(k)}, \frac{\lambda}{\rho}\right) - y^{(k)}$$
$$x^{(k+1)} \coloneqq (A^{\mathsf{T}}A + \rho I)^{-1}(A^{\mathsf{T}}b + \rho v)$$
$$y^{(k+1)} \coloneqq x^{(k+1)} - v$$

- $\bullet \quad \left\| \boldsymbol{x}^{(k)} \boldsymbol{x}^{\star} \right\| = \mathcal{O}(1/k)$
- converges $\forall \rho > 0$
- derived from ADMM

Ex.
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \\ -1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

 $\lambda = 0.1, \ \rho = 5, \ \mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{A}^{\mathsf{T}} \mathbf{b}$

```
\begin{bmatrix} 2.00 & -3.00 & -4.00 & -1.00 & -1.00 \end{bmatrix}
 10 \quad \begin{bmatrix} 2.52 & -0.57 & -0.65 & 0.15 & -0.28 \end{bmatrix}
      \begin{bmatrix} 2.77 & -0.12 & -0.89 & -0.01 & -0.03 \end{bmatrix}
       [2.86 -0.00 -0.96 -0.00 0.00]
                -0.00 -0.97
                                               0.007
       [2.87]
                                    -0.00
       \begin{bmatrix} 2.87 & -0.00 & -0.97 & -0.00 \end{bmatrix}
                                               0.007
                                                0.007
       \begin{bmatrix} 2.87 & -0.00 & -0.97 \end{bmatrix}
                                    -0.00
       [2.87]
                -0.00 -0.97
                                                0.007
                                    -0.00
                                                0.007
       \begin{bmatrix} 2.87 & -0.00 & -0.97 \end{bmatrix}
                                    -0.00
       [2, 87]
                -0.00 -0.97
                                    -0.00
                                                0.007
       [2.87]
                 0.00 - 0.97
                                                0.007
100
                                      0.00
       [3, 00]
                 0.00 - 1.00
                                                [0.00]
                                     0.00
```

