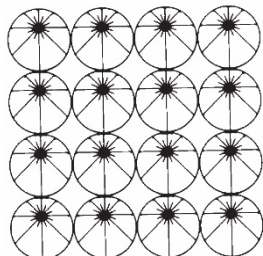


講演録



スパースモデリングによる計測データ解析 ～数理の力で価値ある情報を抽出する～

東京工業大学 情報理工学院 情報工学系 准教授

小野 峻 佑

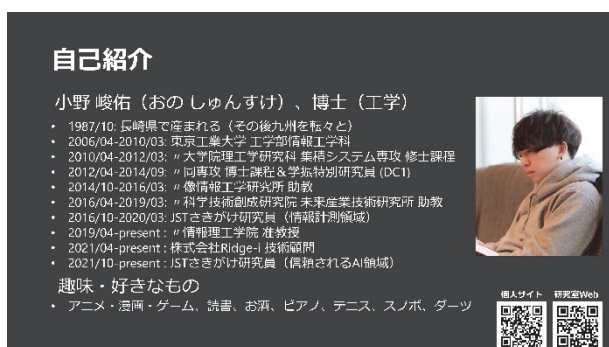
この講演録は、小野先生が 2024 年 1 月 18 日にオンラインで行いました講演の録画をもとに、編集事務局が原稿を作成して掲載するものです。

1 始めに



スライド 1

本日は「スパースモデリングによる計測データ解析」と題してお話します。



スライド 2

東京工業大学の小野です。簡単な自己紹介をスライドにしました。私自身の業績や研究室のウェブサイトには QR コードから飛べますので、興味のある方はぜひお訪ねください。

今日のお話

- 計測データ解析とは何か
- なぜスパース性が重要なのか
- どのように最適化に落とし込むのか

スライド 3

私の専門は、信号処理と数理最適化と呼ばれる情報系の分野です。数理モデリングや数理的なテクニックを使って、実際に計測された生データを解析しています。具体的には、そのままでは使えない画像に適切な数理的アプローチを適用して、画像ノイズの除去や欲しい成分の抽出、ボケの除去などによって問題を解決する研究をしています。

最初に、そもそもそれがどういう問題なのかについて、少し数式も交えて説明していきます。

次に解析のためのさまざまなテクニックの中でも、かなり有効で、しかもさまざまな所に出てくる「スパース性」を中心に、なぜそういう性質が使われているのかについて説明していきます。

さらに、こういう性質を使うときに中心的な役割を果たす数理最適化と呼ばれる技術について、細かい数学的な話には立ち入らずに、最適化がどう使えるのかとか、どう落とし込めばいいのかについて、例を交えて解説していきたいと思います。

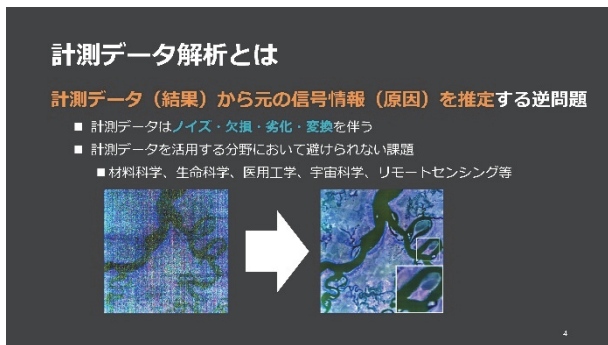
昨今は皆さんもよくご存知のとおり、機械学習、特に深層学習が非常にいろんな場所で使われ、その強力さが認識されています。特に最近では LLM(大規模言語モデル)が一世を風靡しています。

そうした大量のデータを使って問題解決するアプローチもありますが、本日お話しするアプローチとは得意とする所が異なると考えていただければと思います。

もちろん、学習データは大量に手に入るものの、その計測データを解析するためのモデリングの段階で人間には手も足も出ないという状況であれば、ディープラーニングは非常に良い選択肢になります。計測データ解析では、データが「きれいではない」「たくさん手に入らない」「非常に荒くサンプリングされている」など、かなり厳しい状況で計測されたデータが多いのが現実です。ディープニューラルネットワークを満足するレベルで学習させるためのデータが、そもそも手に入らないケースがよくあります。

一方、計測は人間が作成した機器を用いて行われるため、背後に存在する物理的条件や環境的制約など、計測対象の信号に関する事前知識が容易に入手可能です。むしろ、そのような条件を満たす解析が求められることも多々あります。これらの要素をブラックボックス的な深層学習ツールに組み込むことは困難であり、データは少ないものの数理的なモデルが存在する場合には、本日お話しする最適化に基づくアプローチが有効であると言えます。これは「どちらが優れているか」ではなく、それぞれの手法が適しているかという棲み分けの話だと理解していただければと思います。

2 計測データ解析とは何か



スライド 4

まず、計測データ解析について、もう少し具体的に定義していきます。

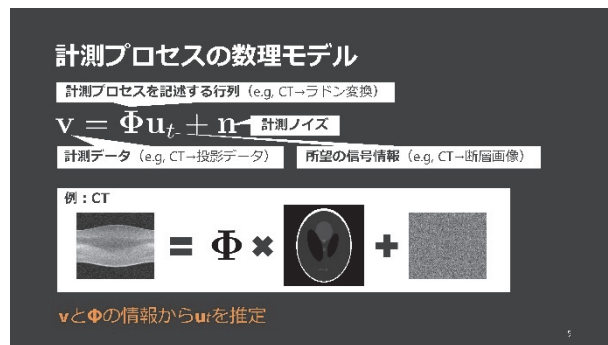
今回の話では、計測対象や現象が直接観測されるため、これらを結果と考えます。そして、結果から背後にある信号情報を推定します。例えばこのスライドの画像は衛星に搭載したハイパースペクトルカメラで地表をセンシングしたものです。実際に計測されるデータは、このようにひどいノイズが乗っています。これは、意図的にノイズを加えたわけではなく、実際に取得したデータから特定のバンド

を抽出した結果の画像です。この状態ではデータの解析や知識の発見は困難です。このような信号情報から右のようなきれいな情報を取得することが目的です。このような計測データから元の信号情報を推定することを、計測データ解析と呼びます。

これは、つまり結果から背後にある原因を推定する「逆問題」だと考えることができます。結果から原因を推定するので逆ということです。一方、原因から結果を推定する問題を「純問題」と言います。

繰り返しになりますが、ノイズや欠損、劣化、そして本来求める情報への変換が計測データに影響を及ぼすことは一般的な現象です。計測を行い、そのデータを用いて何らかの解析を試みる際には、これらの問題は避けて通れない課題となります。材料科学、生命科学、そして CT や MRI などの医療工学分野では、これらの問題は必ずと言っていいほど現れます。さらに、地球惑星科学、宇宙科学、リモートセンシング、その他の産業用途など、多くの分野でこれらの問題が顕在化します。

今回は分かりやすくするため、イメージングデータを題材として説明していきます。もちろん画像ではないデータでも同様の状況が考えられます。



スライド 5

次に、計測データから元の信号情報を推定する逆問題を、数学的なモデルとして定式化することを検討します。

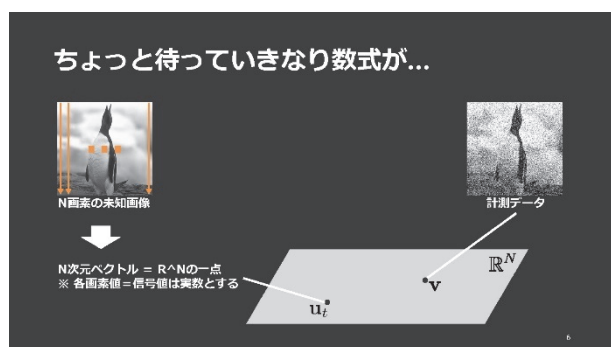
問題の定式化にはさまざまな手法がありますが、ここでは一般的に用いられる線形計測モデルを紹介します。 u_t が欲しい信号情報です。 u_t は画像ですので、本来 2 次元あるいは 3 次元以上のキューブデータですが、ここでは数学的に扱いやすいように N 次元のベクトルとして考えます。

この N 次元のベクトル(u_t)が欲しいが直接は手に入りません。では何が手に入るかというと、 u_t に何らかの計測プロセスを記述する行列(Φ)が作用し、さらに計測時のノイズ(n)が乗っているデータ(v)です。

抽象的な数学の話では実感がわかないと思いますので、

CT(Computed Tomography)と呼ばれる技術を例に説明します。CT は内部の構造を可視化する技術ですので、例えば医用画像系の目的であれば欲しいのは体内の輪切りの画像です。しかし、それを直接計測することはできません。計測で得られるのは、画像にラドン変換と呼ばれる変換がかかり、さらに多少のノイズが乗ったサイン波を重ねたようなシングラムです。これが CT の問題になります。

目指すのはシングラムから内部構造の画像をうまく推定することです。数学的な言葉で言い換えると、計測データ $\mathbf{v}$ と計測プロセスを記述する行列 Φ から $\mathbf{u}_t$ を推定する問題となります。



スライド 6

いきなり数式が出てきて戸惑った方がいるかもしれないので、データを数学的に扱うということの補足説明をしておきます。画像を題材にして説明してきたのでこのペンギンの画像を例に取ります。これは白黒画像ですので各ピクセルに輝度値が格納されています。輝度値は 0 が黒、255 が白で、その段階で濃淡が変化します。

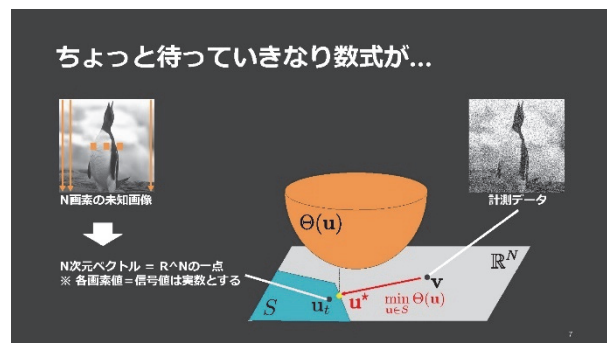
この画像の画素を一つひとつ、上から順に並べていき、一列の最下部まで来たら次の列の画素を取ってくるという方法で考えます。すると、N 画素の未知画像は N 次元のベクトルとして表現できます。したがって、この N 次元ベクトルは、数学的には N 次元ユークリッド空間内の一つのベクトルと解釈することができます。

我々が扱うのは実空間ですので、画素値は実数値を取と考えます。実際は、デジタル画像は 8 ビットで表現されるため一定の乖離がありますが、実数としてさまざまな処理をした後に、最終的に 8 ビットに量子化することがよく行われます。

一方で、計測データは、必要とする画像に大量のノイズが乗ったものしか得られない状況を考えます。すると、求める画像とは異なる位置に計測データのベクトルが $\mathbb{R}^N$ 上に存在することになります。

画素が欠落していたり、元のデータよりも次元が大幅に粗くサンプリングされていたりするケースも存在します。そのため、求める信号情報と計測データは常に同じ空間上に存在するわけではありませんが、今回は説明の簡素化をするために同じ次元での話として

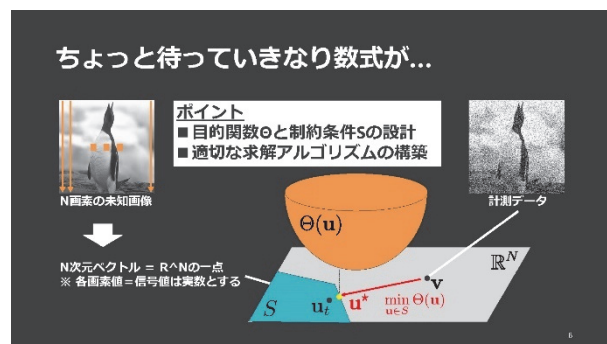
います。数学的に考えるときには、次元が多少変わっても問題はありせん。



スライド 7

ビジュアル的に分かりやすくしたのが、このスライドです。目的は、 $\mathbf{v}$ の情報をスタートにして何らかの最適化を行うことです。最適化というのは、「ある制約条件のもとで、ある目的関数を最小化すること」になります。

欲しい画像は S という制約条件で表される領域内にあり、中でも Θ という関数が小さければ小さいほど望ましい画像であることを、この関数にうまくエンコードするわけです。それができれば、 $\Theta(\mathbf{u})$ を最小化することで、欲しい画像に近い推定結果を得られることとなります。



スライド 8

「そんなこと本当にできるの？」と疑問を持たれるかと思いますが。当然ながら、適切な目的関数と答えは青色の範囲内にあるだろうという条件を数学的にどうやってデザインするのが、まず一つの非常に重要なポイントです。

もう一つは、デザインできたとしても、この最適化問題の次元は、画像の場合には画素数次元の問題になりますので、100 万次元を軽く超えます。はたして現実的な計算量でその解を求めることができるのか、アルゴリズムはどうやって構成するのか。これが、もう一つの大きなポイントです。

今挙げた二つのポイントを、スパース性をキーワードに考えていきます。

最小二乗法とその限界

■ 計測モデルに基づく二乗誤差最小化

$$\min_{\mathbf{u}} \frac{1}{2} \|\Phi \mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 \quad \text{L2ノルムの二乗} \rightarrow \mathbf{u} \text{について微分可能}$$

- Φ から定まる連立方程式を解くことで解析的に最小解が求まる
- しかし、多くの場合において良い推定結果が得られない

スライド 9

このような問題を解くときに最初に考えるアプローチに、最小二乗法があります。スライド 5 で示した計測モデルで考えると、 $\mathbf{v}$ という情報が得られているときに計測ノイズ $\mathbf{n}$ があまり大きくないとすれば、 $\mathbf{v}$ と $\Phi \mathbf{u}$ の二つのベクトルはそれほど距離が離れてないと考えるのが一番自然です。そういう直感的な考えを推定に落とし込むアプローチが、最小二乗法です。計測されたデータ $\mathbf{v}$ と、目的とする情報 $\mathbf{u}$ に Φ を掛けたものは大きく変わらないことをこの数式は表しています。

今、求めたいのは $\mathbf{u}$ です。目的関数は $\mathbf{u}$ について最小化する問題として定式化できます。これは L2 ノルムまたはユークリッドノルムと呼ばれる関数となり、その二乗は $\mathbf{u}$ について微分できます。しかも後で説明しますが、凸関数という非常に性質の良い関数になっているので、帯域的な最小解、すなわち一番いい答えが求められます。しかも微分して $=0$ と置くと、そこが最小の点であり、単なる連立方程式になるため解析的に答えが求まります。しかし、多くの利点があるにも関わらず、実際の推定能力や結果はあまり良くはありません。

最小二乗法とその限界

■ 計測モデルに基づく二乗誤差最小化

$$\min_{\mathbf{u}} \frac{1}{2} \|\Phi \mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2 \quad \text{L2ノルムの二乗} \rightarrow \mathbf{u} \text{について微分可能}$$

- Φ から定まる連立方程式を解くことで解析的に最小解が求まる
- しかし、多くの場合において良い推定結果が得られない
- WHY?
- ノイズの存在 (Φ の条件数が悪いほどノイズを拡大)
- 計測データの次元が信号の次元に比べて小さい

スライド 10

なぜかと言うと、ノイズが乗っているので解析し難いことが多く、ノイズの少ないケースは稀なためです。少しでもノイズの影響が強くなると一気に推定性能が悪化します。少し専門的に説明します。スライドでは条件数と表現している、計測過程を表す行列 Φ が歪(いびつ)あるいは偏りのある分布の場合は、逆にノイズを拡大してしま

うことがあり、いい推定結果が得られません。

もう一つの理由は、そもそもこの Φ が $\mathbf{u}$ の元の次元を大幅に減らしてしまうことにあります。しばしばサンプリングしてしまったり、次元を落としてしまったりする変換になります。このため最小化問題の解が一意に定まらず、無数に解が存在するようになります。要は連立方程式の数が解の次元よりも少ない状況です。したがって、無数に存在する $\mathbf{u}$ のどれかを選ぶことができず、失敗することになります。

例：CT計測

投影データのサンプリング
間隔を粗くすると...

更に粗く

スライド 11

CT 計測を例として、もう少しビジュアルで考察します。欲しいデータがあって、それをノイズがまったくなく、かつ非常に密にサンプリングしたデータがこれ(スライド左端の画像)だとします。

試しにサンプリングの間隔を粗くしてみると、行列 Φ が正方行列から横長の行列になります。 $\mathbf{v}$ の次元を $\mathbf{u}$ より少なくなるようにしていくと、最小二乗法で再構成すると望ましくない影響が著しく現れます(スライド中央の画像)。サンプリングレートを粗くしていくと、さらに顕著になっていきます。これは計測時にノイズをまったく乗せていないシミュレーションですが、ノイズがなくてもこんな状態になってしまいます。

例：CT計測

投影データのサンプリング
間隔を粗くすると...

更に粗く

投影データにノイズが
混入すると...

より強い

スライド 12

サンプリングはせずに、観測データ自体にノイズを乗せていくと、これも最小二乗法で行くとノイズが全然取ないどころか、ひどく拡大されて再構成されます。これも適切ではありません。CT 計測を例に見ても、最小二乗法は簡単に解けるものの有用性が高いとは言えず、もっと効果的なアプローチが必要だということが分かります。

3 なぜスパース性が重要なのか

最小二乗法とその限界

■ 計測モデルに基づく二乗誤差最小化

$$\min_{\mathbf{u}} \frac{1}{2} \|\Phi \mathbf{u} - \mathbf{v}\|^2$$

L2ノルムの二乗→uについて微分可能

- Φ から定まる連立方程式を解くことで解析的に最小解が求まる
- しかし、多くの場合において良い推定結果が得られない

WHY?

- ノイズの存在 (Φの条件数が悪いほどノイズを拡大)
- 計測データの次元が信号の次元に比べて小さい

所望の推定結果を特徴づける付加情報 (事前知識) が必要→**スパース性**

スライド 13

したがって、どのようなアプローチが適切であるかという問いに対する答えは、追加の情報が必要となるということになります。先ほども述べたように、計測モデルに基づいて最小二乗法を考慮するだけでは、良好な解を特徴付けることができないためです。そこで、情報の推定結果や信号情報を特徴付ける事前知識として、有用な要素の一つがスパース性であり、それが現実的に解を求めるアルゴリズムに適用でき、良好な指標となるということをこれから説明していきます。

まずスパース性とは何かについてお話しします。ご存知の方も多いかもしれませんが、言葉で説明すると、全体のデータやベクトルの次元が存在する中で、極めて少数の要素のみが大きな絶対値エネルギーを持ち、残りの大部分が0またはほぼ0に近い値を持つようなデータやベクトルを、スパースと呼びます。

例えば、画像データを例に挙げると、天体画像などはほとんど光が届いてない部分が大半を占めていて、一部にだけ天体が映っています。こういうデータは直感的にもスパースだと分かります。ただ、このようにそのままスパースになっているケースは多くはありません。一般的な自然画像であれば当然ながら各画素が値を持っているので、そのままではスパースではありません。しかし、適切な変換を掛けるとスパース性が見えてくるのが少なくありません。例えば画像の場合、人間が目で見ても意味のある構造だと思ふものにはある種の連続性があるので、エッジをまたぐような箇所でない限り、隣り合う画素値は非常に似ています。

したがって、隣り合う画素同士の差分を取り、差分のマッピングを可視化すると、エッジが立っている所以外はほとんど値が0または0に近くなり、エッジの部分だけが大きな値を持つことになります。まさにスパースという性質がそのまま現れています。

他にも画像の場合は、ウェーブレット変換という古典的な信号処

理技術で変換を掛けると、スパース性が見えてくることもあります。画像に限らず、さまざまなデータから人間が何か本質的な意味を見出そうとするときには、何らかのスパース性が隠れているケースが頻繁に見受けられます。有名なオッカムのカミソリに例えられることもあります。そもそもデータというのは本質を説明するために必要な要素数に比べて、次元が無駄に大きいケースが多いのです。スパース性は、その中からできるだけ本質的なものを見つけようという思想で成り立っています。

さまざまな信号情報にスパース性があることはお分かりいただいたとして、ではなぜこのスパース性が計測データ解析において重要になるのかを説明します。

スパース性の恩恵

■ 我々にとって“意味のある”信号とノイズの本質的違いは？
→ その代表例として**スパース性**が挙げられる



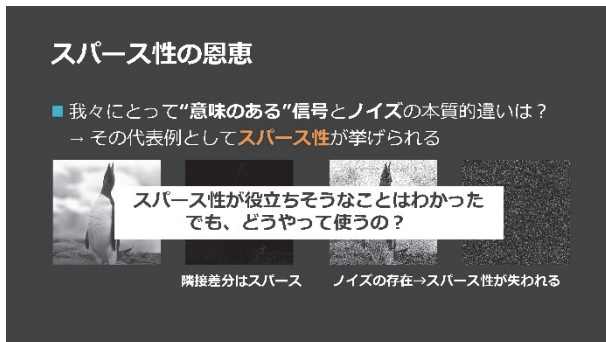
隣接差分はスパース ノイズの存在→スパース性が失われる

スライド 14

我々にとって意味のある信号と、ノイズのように何の規則性・法則性も見出せないようなデータとの本質的違いを峻別するために使えるのが、スパース性です。さきほどの画像を例に挙げると、きれいな画像は隣接する画素間の差分を取ると、エッジ部分だけ値を持って他は0になるという話をしました。仮にこの画像に大量のノイズが乗っているとすると、ノイズ自体は無秩序ですので基本的に相関的なものは存在しません。相関があるノイズもありますが、それは相関がない軸で見ることにします。難しい話はいろいろありますが、ここでは単純なガウスノイズを考えます。すると、当然ながら隣接差分は値がまったく違うので、スパースになりません。

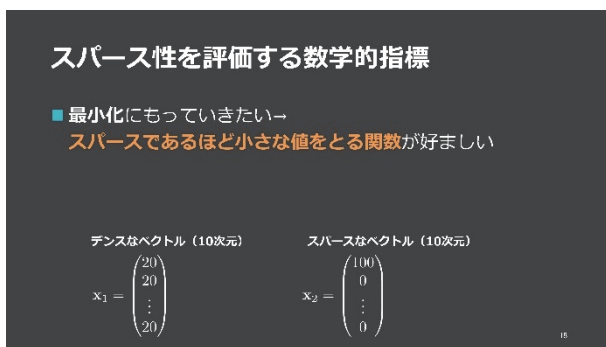
したがってノイズがあれば、そこにスパース性は見えません。逆に、差分を取ったときにスパースに見えてくるものが、本質的な情報だろうと考えることができます。これが、スパース性がなぜ役立つのかに対する非常に簡単な答えになっています。つまり、欲しい情報だけをうまく特徴付けるために使えるから、ということなのです。

4 どのように最適化に落とし込むのか



スライド 15

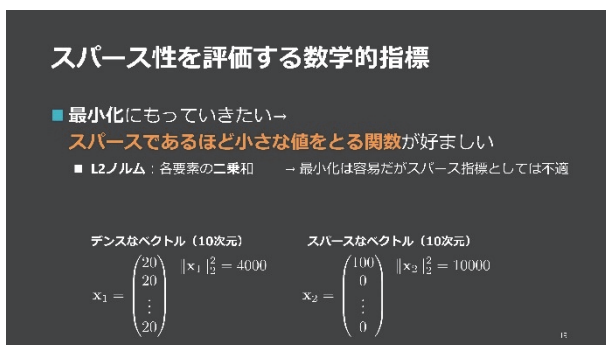
では、そうしたスパース性を、実際にどうやって計測データ解析に落とし込んでいくのかを説明します。



スライド 16

スパース性を解析に使うためには、スライド 13 で紹介した目的関数の最小化問題として、最小二乗法と同様に、小さくすればするほどよりスパースになるような指標を考えていきます。そうすることで最適化問題・最小化問題にスパース性をうまく取り入れることができるようになります。

本当にそうした関数が設計できるのか説明をするために、形式的に 10 次元のベクトルを 2 種類用意します。一つはスパースではないデンスなベクトル。これは 10 次元の各次元に 20 という値が均等に入っています。もう一方はスパースなベクトルで 1 次元目に 100 という大きな値が入り、残りは 0 です。

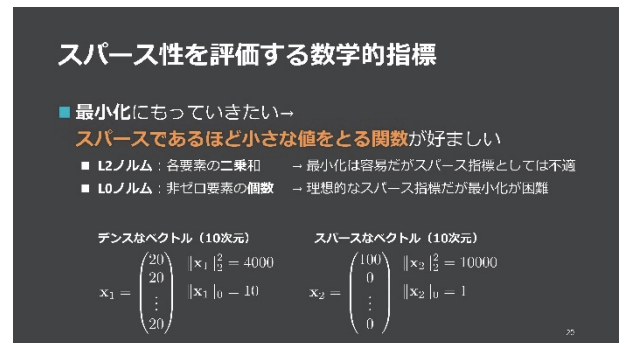


スライド 17

このとき、このベクトルを評価する関数を考えていきます。

まず、最小二乗法のときに使われた L2 ノルム、ユークリッドノルムと呼ばれる指標関数を考えてみます。これは各ベクトルの要素の二乗和で定義されるので、それぞれのベクトルの値を計算すると、デンスなベクトルでは 20 の 2 乗を 10 回足すので、全部で 4000 になります。

一方スパースの方は 100 の 2 乗と、残りは 0 の 2 乗ですので値は 1 万です。スパースの値の方が大きくなっています。後で説明しますが、基本的には凸関数を最小化に持っていきたいわけですが、つまりスパースがあればあるほど小さい値を取る関数が好ましいのですが、真逆の結果です。したがって、この L2 ノルムの二乗は、微分できるなど最適化として扱いやすい側面をさまざまに備えてはいるものの、スパース性を評価する指標としては望ましくないことが、こういう簡単な例を見ても分かります。



スライド 18

ではスパース性を非常に厳密に評価するためには、どういう関数にすれば良いのか。この視点から見ると、L0 ノルムと呼ばれる指標が視野に入ります。数学的にはノルムの性質を満たしていないものの、形式上は L0 ノルムと呼ばれ、入力されたベクトルの中の 0 ではない要素の個数をカウントする関数です。したがってデンスなベクトルの場合は 10 の要素すべてが値を持っているので 10、スパースなベクトルの場合は最初の次元しか値を持っていないので 1 という値を返します。

L0 ノルムはスパースであればあるほど値が小さくなるので、理想的なスパース指標です。しかし、非常に最小化・最適化が難しい関数でもあります。なぜなら値の有無をカウントするというのは組み合わせ論的な問題であり、次元が少しでも大きくなると最適化の計算において組み合わせ爆発が生じ、NP ハードな問題となります。例えば 100 万画素の場合は 100 万次元といった大規模な次元になり、計算は現実的に不可能となります。理想的ではありますが扱いづらい、あるいは扱うことができない指標です。さらに、少しでも値があ

ればカウントしてしまう問題があります。例えば先ほど(スライド 14)の画像の差分では黒く見える部分(スライド 14 左から 2 番目の画像)も完全に 0 ではなく、非常に小さい値を取っているわけですが、L0 ノルムではこれも値ありでカウントしてしまいます。指標としては厳格すぎる、あるいは柔軟性に欠けるため、実際の使用には難しさが伴います。もちろん、スパース性を厳密に評価したい場合には、定義上、L0 ノルムは理想的な指標であることは確かです。

スパース性を評価する数学的指標

■ 最小化にもっていきたい→

スパースであるほど小さな値をとる関数が好ましい

- **L2 ノルム**：各要素の二乗和 → 最小化は容易だがスパース指標としては不適
- **L0 ノルム**：非ゼロ要素の個数 → 理想的なスパース指標だが最小化が困難
- **L1 ノルム**：各要素の絶対値の和 → 良い妥協点 (妥当なスパース指標 & 凸関数)

デンスなベクトル (10次元)

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 20 \\ 20 \\ 20 \\ \vdots \\ 20 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \|\mathbf{x}_1\|_2^2 &= 4000 \\ \|\mathbf{x}_1\|_0 &= 10 \\ \|\mathbf{x}_1\|_1 &= 200 \end{aligned}$$

スパースなベクトル (10次元)

$$\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \|\mathbf{x}_2\|_2^2 &= 10000 \\ \|\mathbf{x}_2\|_0 &= 1 \\ \|\mathbf{x}_2\|_1 &= 100 \end{aligned}$$

スライド 19

ではどうするかということが出てくるのが、L1 ノルムと呼ばれる指標です。L2 ノルムは各要素の二乗ですが、L1 ノルムは各要素の絶対値の和として定義されます。

先ほどの 2 つの例で L1 ノルムの値を計算してみると、デンスなベクトルは 20×10 で 200、スパースなベクトルは 100 が 1 個で残りは 0 ですので 100。この例では、スパースな方の値が小さくなっています。そうなるような例を作ったということもありますが、少なくとも L2 ノルムでは破綻するケースでも、スパースな方の値が小さくなる性質を持っているため、L2 ノルムよりは指標としては優れています。

L1 ノルムは、微分はできませんが、この後説明する凸関数という性質を満たし、組み合わせ論的な関数でもないため、ある程度効率的に最適化できることが知られています。したがって、L1 ノルムをスパース性の指標にするのが妥当だと考えられます。

スパース性を評価する数学的指標

■ 最小化にもっていきたい→

スパースであるほど小さな値をとる関数が好ましい

- **L2 ノルム**：各要素の二乗和 → 最小化は容易だがスパース指標としては不適
- **L0 ノルム**：非ゼロ要素の個数 → 理想的なスパース指標だが最小化が困難
- **L1 ノルム**：各要素の絶対値の和 → 良い妥協点 (妥当なスパース指標 & 凸関数)

デンスなベクトル (10次元)

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 20 \\ 20 \\ 20 \\ \vdots \\ 20 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \|\mathbf{x}_1\|_2^2 &= 4000 \\ \|\mathbf{x}_1\|_0 &= 10 \\ \|\mathbf{x}_1\|_1 &= 200 \end{aligned}$$

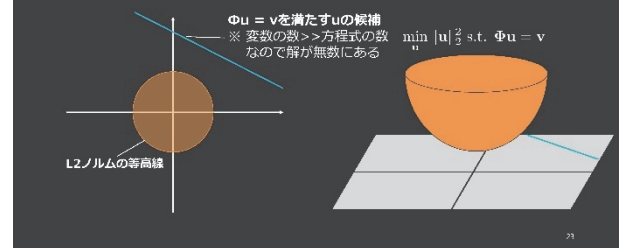
スパースなベクトル (10次元)

$$\mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 100 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \begin{aligned} \|\mathbf{x}_2\|_2^2 &= 10000 \\ \|\mathbf{x}_2\|_0 &= 1 \\ \|\mathbf{x}_2\|_1 &= 100 \end{aligned}$$

スライド 20

もう少し踏み込んで説明しています。なぜ L1 ノルムがスパース指標として妥当なのか、ビジュアルで考察します。

なぜL1ノルムがスパース指標？

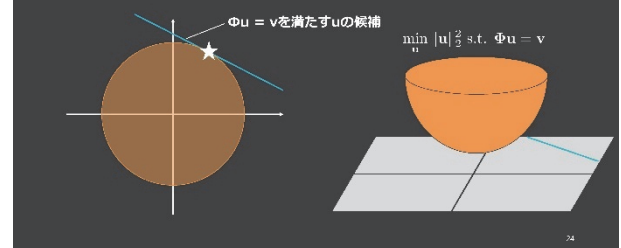


スライド 21

形式的な計測データ解析の問題を少し考えてみます。まず、簡便化のためノイズがないとすると、計測モデルから考えて観測データ $\mathbf{v}$ と $\Phi \mathbf{u}$ は必ず一致します。そこで $\Phi \mathbf{u} = \mathbf{v}$ を満たしながら L2 ノルムが最小になるような解を見つける問題を考えます。仮にこの $\mathbf{u}$ がスパースだとしたときに、スパース性の指標として L2 ノルムを使っていることになります。すると $\Phi \mathbf{u} = \mathbf{v}$ を満たす $\mathbf{u}$ の候補は、 Φ の次元が落ちている状況を考えて、最初にも言ったように $\mathbf{u}$ の候補は無限にあるわけです。要は最小二乗解の集合のようなものだと思います。その中で一番スパースなものを見つけることを考えています。

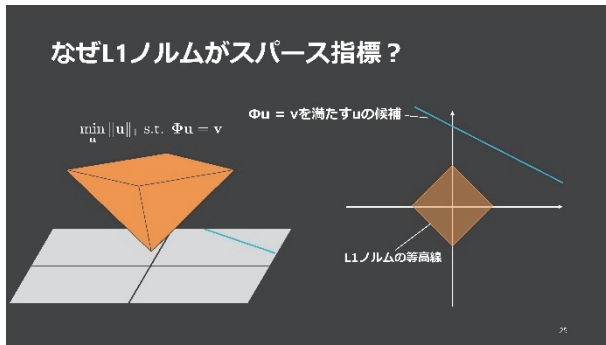
するとスパースなものを見つけるための目的関数として L2 ノルムの二乗を持ってきた場合、2 次元空間上で関数を考えるとこのスライドのように可視化できます。これを真上から見ると、L2 ノルムの等高線がきれいな円になります。これを少し大きくしていった、初めて青い線と交わった座標、この最適化問題の解になります。

なぜL1ノルムがスパース指標？



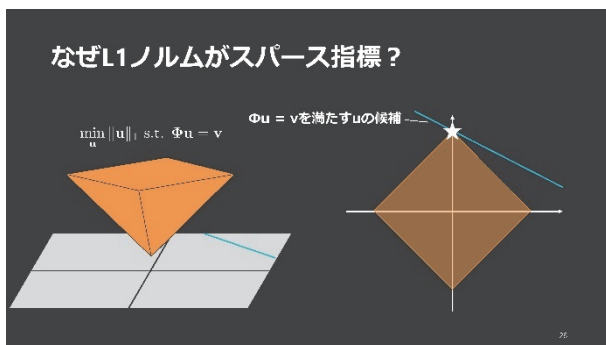
スライド 22

それは★の位置ですが、その解はスパースではありません。2 次元空間においてスパースの解は、必ず横軸あるいは縦軸のどちらかの軸上にあります。横軸あるいは縦軸のどちらかの値が 0 になるケースが、2 次元においてはスパースであるためです。この円の等高線を広げていくと、軸上でない所で青い直線と交わります。したがってこれはスパースではなく、非スパースな解ということです。L2 ノルムがうまく働いていないことが分かります。



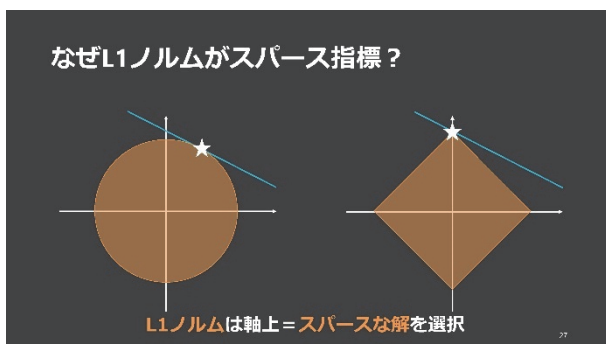
スライド 23

L2 ノルムを L1 ノルムに変えると、今度は菱形の等高線になります。縦横各軸の所で尖っている等高線になるわけです。この性質は次元を大きくしていても、可視化はできませんが、同じです。



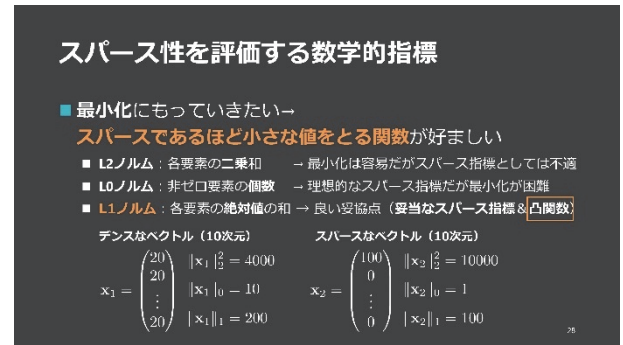
スライド 24

したがって、徐々に等高線を大きくしていくと軸上で交わるケースがほとんどになります。当然ながらスパースな解が L2 ノルムよりも選んでくれることが分かります。



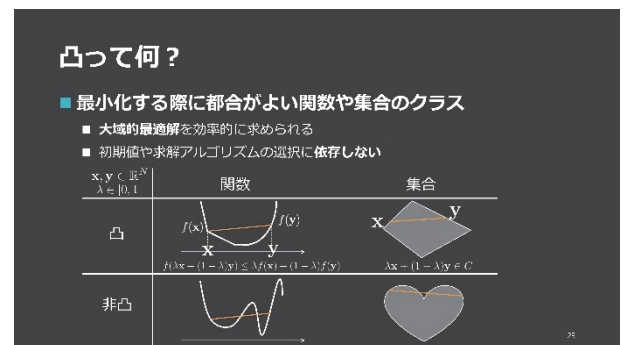
スライド 25

L1 ノルムは、解が軸上で交差する傾向にあるため、L2 ノルムに比べてスパース性の高い解を効果的に選択することが期待できます。この特性は、L1 ノルムがスパース性を定量化するための適切な数学的指標になる根拠の一つ目です。



スライド 26

もう一つの根拠は、L1 ノルムが凸関数であることです。ここまでにも最適化に役立つのは凸関数になっているからだと節々でお話ししてきましたが、凸関数とは何かについてももう少し説明します。



スライド 27

凸関数は数学的な関数や集合に対する性質で、簡単に言うと最小化する際に非常に都合が良い関数や集合のクラスのことです。大域的な最適解を効率的に求められる保証があり、初期値や解くためのアルゴリズムの選択に依存しない、ある種のロバストネス (robustness: 堅牢さ) があることも利点です。

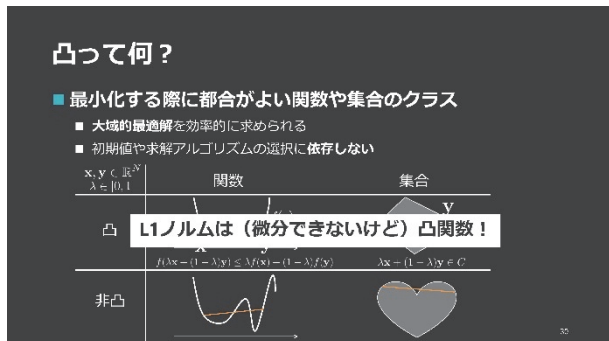
最近流行りのディープラーニングでは、ストキャスティック・グラディエント (Stochastic Gradient: 確率的勾配降下法) という最適化を使って重みを学習します。しかし、ニューラルネットワークの重みの学習問題はこういう凸最適化にはなっておらず、非常に複雑な問題です。初期解や学習アルゴリズムをどうするか、どれくらいの反復で止めるかなどによって、結果、つまり学習される重みが変わってきます。

たくさんの谷と山があるような複雑な目的関数の方が表現力は高いものの、必要な試行錯誤にかかるコストが非常に大きくなります。しかし凸関数、凸最適化問題には、そういう難しさのないことが大きな利点です。

視覚的に表すと凸関数はお碗型で凹みがなく、非凸な関数は山と谷が入り組んでいます。同様に凸集合は凹みのない集合で、境界上の任意の 2 点を結ぶ線分のすべてが必ず集合内に入ることが

数学的な定義です。非凸な集合では、端点同士を結んだ線分が集合の外に出てしまう箇所が存在します。

凸最適化問題とは、凸関数と凸集合によって記述される問題とすることになります。



スライド 28

L1 ノルムは、微分はできませんが、凸関数ですので凸最適化の利点を享受できます。

ここからいよいよ画像のスパースを L1 ノルムで評価していく話をしていきます。L1 ノルムがスパースを評価するために妥当な指標だということをお願いしていただき、ではそれをどう使っていくのかについてもう少し踏み込んでいきます。

説明を簡素化するため、4 画素しかないと仮定しましょう。画素が 2×2 で並んでいる画像です。画像のスパースを見ていくために、隣接する画像の差分を取るという話を前半にしました。

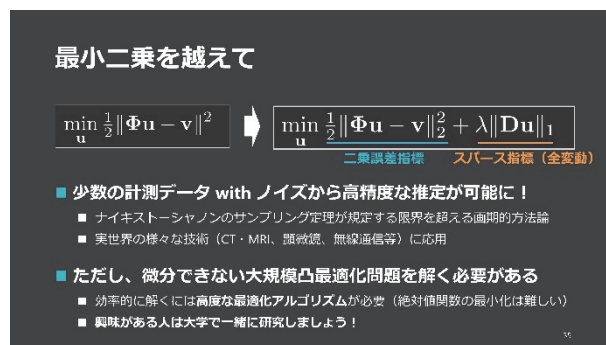
横の差分と縦の差分を取る計算を数学的に書くとき次のようになります。

$$\begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \\ u_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

D u

画素 u_1, u_2, u_3, u_4 を縦に並べたベクトル u に対して、-1 と 1 をうまく並べた行列を考えます。上の 2 行が縦の差分、下の 2 行が横の差分を計算する行列になっています。すると、この行列で 4 画素の画像の隣接差分が取得できます。

先ほどお話したように、画像は隣接差分を取った後にスパース性が出てきますので、 u に D を掛けたもの (Du) は u が画像であればスパースになるはず。つまり、この D を掛けた後の L1 ノルムをスパース性の評価指標にすれば良いことになります。非常に単純でストレートな話です。実はこの指標にはいくつかバリエーションがあり、全変動 TV(Total Variation)と呼ばれる、画像解析では非常に有名な最適化指標の一つになっています。



スライド 29

ようやくスパース性を評価するための指標が、画像のケースで具体的に一つ設計できました。そこで最小二乗法の欠点をうまく解消する最適化の定式化を考えます。非常に単純です。最小二乗法で使われた指標も、そのまま使います。なぜなら、計測されたモデルをある程度満たすという思想を含んでいるからです。しかし、それだけでは Du を決められませんので、 u が差分を取った領域でスパースになってほしいという気持ちを λ というパラメータにして、うまくバランスを取ります。 λ をどう決定するかは深く考えるべき問題であり、それだけでさまざまな研究があるほどです。 λ をある程度適切な値に決められたと仮定すると、計測モデルをある程度満たしながら、スパースな答えを見つけてくれる問題になっているわけです。

この指標を使うと、次元が非常に落ちていて、しかもノイズが乗っているような計測データからも、かなり高精度に推定できることが知られています。ナイキスト=シャノンの定理が規定する限界を超えた粗いサンプリングをされても、背後にスパース性があれば、こうした最適化で元の信号が適切に再構成できることが理論的にも証明されています。もちろん仮定はありますが、理論的にも解析されている圧縮センシングと呼ばれる理論の背後にある最適化モデルになっています。

実際に CT や MRI、顕微鏡、無線通信など、実世界のさまざまな分野で、これ、あるいはこれのバリエーションが定式化に応用されています。Lasso と呼ばれるものもこれに似ています。Lasso の場合は D がなく、直接 u のスパースを見ますが、同じような定式化です。

この問題は、凸最適化という望ましい特性を持つものの、微分可能ではないため、微分を基礎とする従来の最適化手法が適用できません。具体的には、勾配の方向に沿って降下する手法や、導関数を 0 に設定して解析的に解を求めるアプローチが使用できません。

さらに、画像解析などの応用において次元数が 100 万を超えるような場合には、この問題は微分不可能な大規模凸最適化問題と

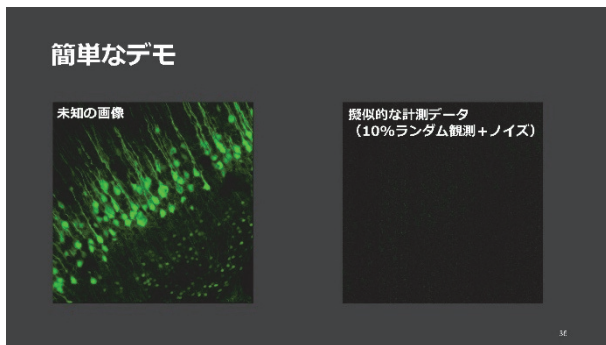
いう特定のクラスに属し、その取り扱いには著しく困難です。以前からよく利用されている最適化手法が、そのまま使えません。ディープニューラルネットワークの学習においても自動微分が頻繁に用いられ、微分可能性が暗黙のうちに前提とされていますので、その領域で主流の最適化手法も利用できないことを意味します。

強引に微分可能にすればいいのではという発想もありますが、そうするとスパース性をうまく評価する能力がどうしても毀損されてしまいます。したがって、できればこのまま最適化したいわけです。

幸い私が専門にしている「近接分離最適化」という技術をうまく駆使すると、こういう問題を反復法ではありますが、かなり効率的に解けることが知られています。

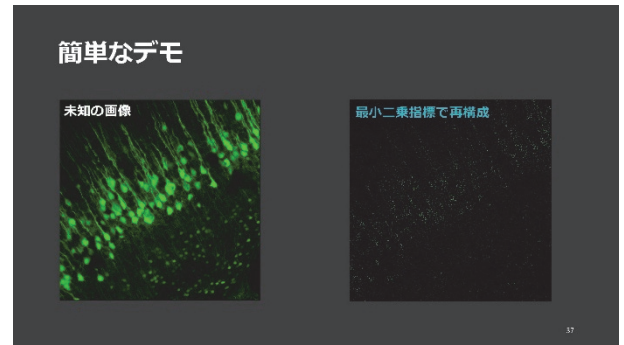
ただここについては高度な最適化をもっと深く学ぶ必要がありますので、学生向けのメッセージとかぶっていますが、大学の先生と一緒に研究することが重要になってくると思います。

単に「こういう問題を解きたいのだが、いいアルゴリズムはどの辺りを探ればいいだろう」といったような、ある程度定式化された汎用的なツールであれば、Lasso のように公開されているものを利用するのも手です。ただ、特定の計測や特定の設定にカスタマイズした定式化や手法が必要であれば、踏み込んで勉強する必要があるということです。学習するための参考文献や書籍の情報も最後の方にご紹介しますので、ご覧ください。次にこの解析手法が、実際にどれくらいワークするのかを簡単なデモでお見せします。



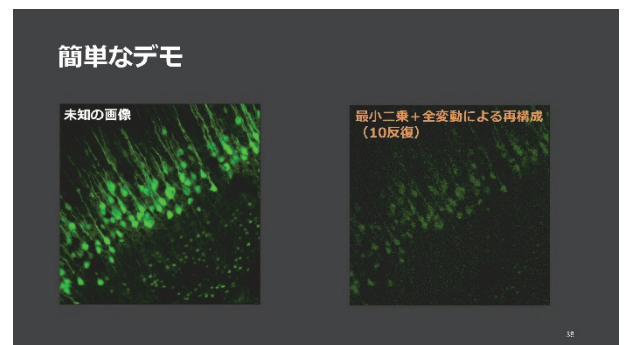
スライド 30

これは、顕微鏡画像です。シミュレーションのために左が欲しい画像だとします。実際には得ることができません。得られる計測データはこの中の 10%です。つまり 90%以上の情報は欠落し、10%だけが観測され、さらにノイズが乗っている状況を考えます。



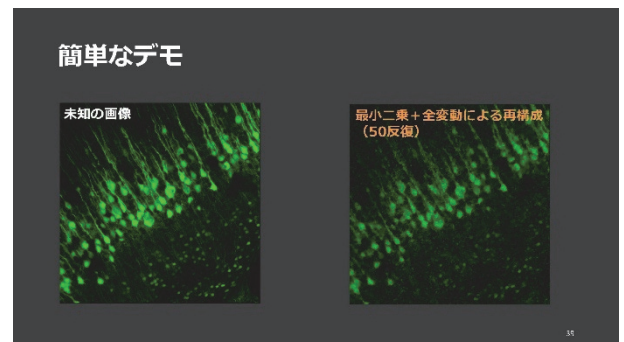
スライド 31

このときに最小二乗法を使って推定した結果が右です。信号の値が多少増幅されているようですが、元の画像をうまく推定できたとは到底言えません。



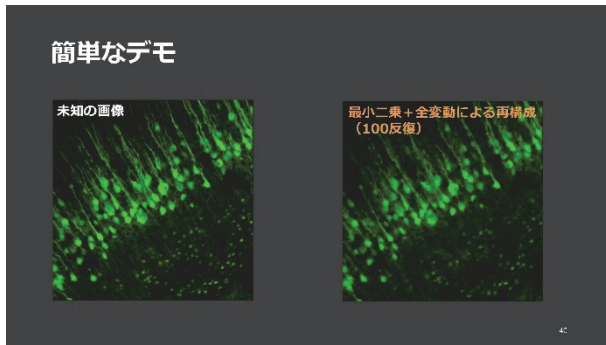
スライド 32

これに対して、全変動を使った最適化問題で推定をします。反復法で解いていきます。10 反復、



スライド 33

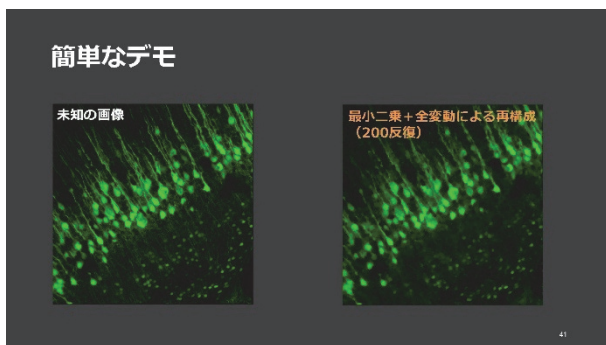
50 反復、



スライド 34

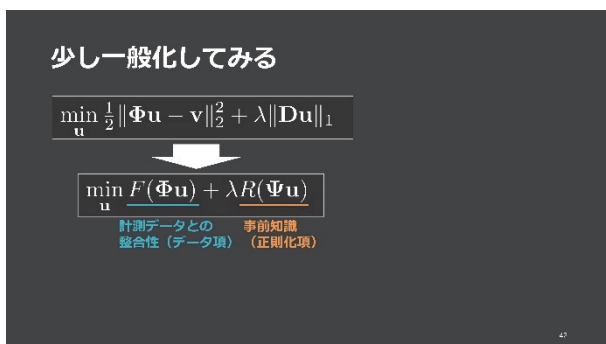
100 反復。反復を繰り返すごとに最適解へ近づいていき、この程度にまで再構成できることが分かります。

したがって、スパースの導入は、最小二乗法の解と比べると改善が著しく、非常に強力なツールになると言えます。



スライド 35

200 反復になってくると、解がよい所に収束してきているので、画質はあまり変わらなくなっています。

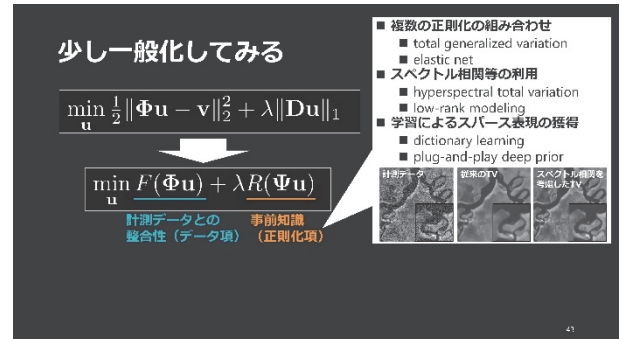


スライド 36

ここまで画像を題材に特定の例にフォーカスして、分かりやすさを優先してご説明してきました。ここからさまざまな派生や一般化を考えることができます。

このモデルは、最小二乗法を用いて計測モデルに近似し、スパース性という事前知識をエンコードしています。しかし、必ずしもこの関数が必要だというわけではありません。少し抽象化すると、ここ(青アンダーライン部分)は結局、計測モデルに従って計測デー

タとの整合性を見る指標であれば良いわけです。同様に、ここ(オレンジアンダーライン部分)はスパースだけでなく、さまざまな事前知識を表現できます。先ほど述べた周期性もその一つで、周期性の場合はフーリエ変換して L1 ノルムを見れば良いわけです。



スライド 37

そのように一般化すると、さまざまなケースが考えられます。例えば正則化項、つまりスパース評価する項は一つでなくてもいいし、もっとアドバンストな関数を使ってもいいわけです。複数の正則化を組み合わせることもできます。例えば全変動を一般化したトータル・ジェネラライズド・バリエーション(total generalized variation)や、L1 と L2 を組み合わせるエラスティック・ネット(elastic net)と呼ばれる統計的な推定でも使われる指標などが有名です。

また、通常の画像ではなく、光の分光を非常に細かくして得られるハイパースペクトルデータと呼ばれるものは、画素の隣接差分だけではなく、スペクトル方向の相関もきちんとモデル化できるような指標を考えることができます。

今回は主にベクトルについてお話してきましたが、行列データのランク(回数)が小さいという性質のことも、ローランクモデリング(low-rank modeling)としてスパースと同じぐらい活発に研究されています。また、スパースに表現する変換自体がどのようになるのか不明な場合には、 $\mathbf{D}\mathbf{u}$ をデータから学習する方法もあり、ディクショナリーラーニング(dictionary learning)と呼ばれています。また、ここ($\lambda \|\mathbf{D}\mathbf{u}\|_1$)の正則加工自体をディープラーニング的に構築しようとする、最適化とディープラーニングを融合したようなアプローチもあります。これはかなりホットな最近の研究です。

正則化のデザインについては、さまざまな方法があります。例えばスペクトル相関を用いたハイパースペクトラル・トータル・バリエーション(hyperspectral total variation)を使用すると、従来の空間的な画素値の差分のスパース性だけを考慮した場合の復元(中央の画像)と比較して、スペクトル相関を考慮することで、川の形状を適切に復元しつつ、ノイズを効果的に除去することが可能となります(右の画像)。

少し一般化してみる

$$\min_u \frac{1}{2} \|\Phi u - v\|_2^2 + \lambda \|\mathbf{D}u\|_1$$

$$\min_u F(\Phi u) + \lambda R(\Psi u)$$

計測データとの
適合性 (データ項)

事前知識
(正則化項)

- 複数の正則化の組み合わせ
 - total generalized variation
 - elastic net
- スペクトル相関等の利用
 - hyperspectral total variation
 - low-rank modeling
- 学習によるスパース表現の獲得
 - dictionary learning
 - plug-and-play deep prior

計測データ 従来のTV スペクトル相関を考慮したTV

希望の画像 計測データ 再構成結果

- 非ガウス性のノイズ
 - ポアソンノイズ、乗算型ノイズ、混合ノイズ等
- その他の劣化
 - 構造を持ったノイズ、外れ値、欠損等

スライド 38

同様にデータ項の部分についても、いろいろなケースを考えることができます。ノイズの種類が変化すると、指標の性質も変わります。二乗誤差が適切な指標となるのは、ノイズがガウス分布に従う場合のみです。しかし、実際の計測では、ポアソン分布のノイズや、信号値に比例して強度が変化する乗算ノイズ、またはこれらが混在するケースが多く見られます。このような場合、データ項を工夫し、二乗誤差以外の関数で設計する必要があり、この分野では多くの研究が行われています。

また、統計的に記述することはできないが、何らかの特定の構造を持つノイズも存在します。例えば、「特定の位置に現れる」や「特定の空間的形状を持つアーチファクト」などのノイズ、または「どこに現れるかは不明だが、稀に大きく外れた値が現れる」、あるいは「欠損」などもその他の劣化として分類されます。これらの特性を適切に捉えるようなデータ項の設計にも、さまざまな手法が存在します。

例えば、この画像(下列)も衛星画像で、計測データにはガウス分布に従うノイズに加えて、白飛びや黒飛びのような外れ値が含まれています。さらに、このようなスペクトルを計測する際には、1行ずつスペクトル情報をスキャンして計測するラインスキャン方式が主流ですが、スキャンミスによるライン上の欠損やノイズも含まれています。これらは実際の計測でよく見られるノイズで、ガウス性のノイズとはまったく異なる性質を持っています。これらの特性を適切に捉える指標を考えることで、このケースでもこの程度(下列右端)の再構成が可能となります。これはかなりきれいに再構成された画像で、計測データからノイズを除去した実際の結果です。

5 最近の事例



スライド 39

ここでいったん基本のお話は終わりにして、ここからうちの研究室で行っている、比較的最近の研究事例を題材に話をしていきたいと思います。

私の研究室では、計測データ解析に関するさまざまな研究をしています。中でも衛星画像リモートセンシングの応用例について、最近の研究成果を一つご紹介したいと思います。これは2022年に「IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing」というリモートセンシング系の論文誌に掲載された成果になります。私の研究室の博士課程学生が行った研究の一つです。ライン状に乗ってくるノイズの除去についての研究です。

ストライプノイズとは

- whiskbroom/pushbroom方式のイメージングで生じる
 - 例：ハイパースペクトルイメージング、熱赤外イメージング
- 原因：不完全な校正、検出器の応答変動、信号値の飽和、焦点面アレイの不均一性等
- 特徴：
 - 強度：1方向に一定だが、各ストライプは異なる
 - 周期性や分佈は一律ではない(ことが多い)
- 影響：反射率や放射輝度に多大な不確かさをもたらすため、その後の処理・知識発見で大きな問題となる

スライド 40

まず、ストライプノイズについて説明します。主にウィスクブルーム/プッシュブルーム(whiskbroom/pushbroom)と呼ばれる方式のイメージングで生じるノイズです。スペクトラルをアレイディテクタでスキャンして取得するようなケースで起こります。ウィスクブルーム/プッシュブルーム方式は、ハイパースペクトルイメージングや熱赤外線、サーマルインフラレッドビデオ(Thermal Infrared Video)などが利用されている監視カメラでよく使われています。

これ(下の画像)が実際の画像データと実際のノイズです。ライン状にノイズが乗ってきます。原因は不完全な校正や検出器の応答変動、信号値の飽和などさまざまですが、特性は共通しています。

一つ目の特性は基本的に強度が 1 方向にほぼ一定で変わらないことです。ただし、ストライプが横のストライプに移ったときには、強度が変動することがあります。ですが、走っている方向に関しては多くの場合不変です。もう一つは、特定の周期で島が現れたり何か分布があったりすることはなく、それらがランダムであるケースが多いことです。

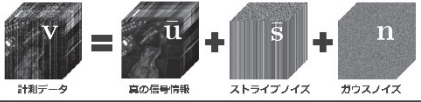
これからストライプノイズの研究についてお話していきます。解きたい問題や解析したいデータを抱えているときに、どういう手順で最適化まで考えていくのか、この例を通して実感していただければと思います。

まず計測方式からスタートして、どんなノイズが乗るのか、その特徴を言葉で表すとどうなるか、それをどうやって最適化の中に落とし込んでいくかという具合に話をしていきます。

このノイズは取らないと、背後のデータに大きな不確実性をもたらします。例えばこのデータから異常検知したいなどさまざまなニーズがある場合、事前に適切に取っておく必要があります。

最適化に基づくストライプノイズ除去

■ 計測モデル



■ アプローチ：信号情報（ハイパースペクトルデータ）とストライプノイズを同時に推定する最適化問題として定式化

■ ストライプノイズを特徴づける数理的指標の設計が重要

スライド 41

さまざまなアプローチがありますが、最適化数理モデルでストライプを除去する手法は、いまだに旺盛に研究されています。

まず、真に欲しい信号情報にガウスノイズが乗っていて、さらにストライプノイズも乗っているようなモデルを考えます。得られる計測データ $\mathbf{v}$ は、欲しい情報 $\mathbf{u}$ に $\mathbf{s}$ と $\mathbf{n}$ も重畳しています。最適化にはいくつかのアプローチがありますが、我々は $\mathbf{v}$ から $\mathbf{u}$ だけではなく $\mathbf{s}$ も推定する問題として定式化することを目指しました。ガウスノイズも暗に推定していますが、 $\mathbf{u}$ と $\mathbf{s}$ を足したものを $\mathbf{v}$ から引いたのが残りのガウスノイズだと見ているわけで、明示的に推定するのは真の信号情報 $\mathbf{u}$ とストライプノイズ $\mathbf{s}$ になります。ストライプノイズを明示的に推定する理由は、非常に特徴的な構造を持っているため、うまく特徴付ける関数を設計すれば分離できるという立場に立っているからです。したがって、それを特長づける指標の設計が非常に重要になります。

既存のストライプノイズ特徴づけ

- スパース/グループスパース性 [Zheng+, T-GRS 2020] [Sun+, GRS 2020]
 - 方法：L1/混合L1.2ノルム最小化
 - 特徴：効率的に最適化できるがストライプノイズの特徴づけとしては弱い
- 低ランク性 [Cheng+, T-GRS 2016] [Hu+, T-GRS 2021]
 - 方法：核ノルム最小化
 - 特徴：ストライプ構造の特徴づけには適切だが特異値分解が必要で重い
- 平滑性 [Dou-, Remote Sens. 2018] [Liu+ T-GRS 2018]
 - 方法：ストライプノイズの方向に沿った全変動（Total Variation）最小化
 - 特徴：それなりに上手く特徴づけられるがイメージングデータに対する正則化と競合しがち

スライド 42

このアプローチの研究はたくさんあり、この時点では大きく三つの方向性で、ストライプノイズを特徴付ける方策が検討されていました。

一つ目はスパース性を使った特徴付けです。ストライプノイズが乗っているとはいえ、画像の全画素を走ってはいないだろうという事前知識に基づいたものです。これに関する研究は最近でも多いのですが、ストライプノイズの構造の特徴づけとしてはやや雑です。L1 ノルムを使って効率的に最適化できるものの、1 方向に一定の輝度を持つ性質などが考慮されていないため特徴付けとしてはかなり弱く、あまり性能が出ないのです。

二つ目が、低ランク性を使った特徴づけです。今回は紹介していませんが、核ノルムと呼ばれる凸関数を使います。ストライプノイズ成分を 1 枚 1 枚行列データとしてスライスして見ていくと、1 方向に同じようなノイズが乗っています。この場合、この行列はランクが小さいと見ることができます。したがって、ランクが小さくなるような最適化をすればいいだろうという発想です。実際、ストライプノイズが一定方向に重畳している構造をかなりうまくモデル化しているので性能自体は出ますが、このサイズ(スライド 41 ストライプノイズ)の行列の特異値分解を 1 反復ごとに毎回行う必要があります。特異値分解という行列分解をして、そこで出てくる特異値の値を削って元に戻す操作を繰り返す必要があり、計算量が膨大になってしまう欠点があります。

三つ目として、平滑性という概念を使った方法があります。ストライプノイズは 1 方向に走りますので、その方向で差分を取ると同じ値を取り続けるため値は 0 に近くなります。差分を 1 方向に取った後の L1 ノルムを見る、つまり特定の方向に関する全変動を見ればいいのかという提案もあります。これも非常にリーズナブルです。一方で、乗っている画像自体も全変動の小さい、意味のある構造を持っている画像のため、峻別という意味では競合しがちです。 $\mathbf{u}$ の正則化をどうするかによってかなり性能が変わるため、あまり適切ではないという問題があります。

ストライプノイズの特徴付けに関して、3 種類の既存手法を概説しましたが、どれも実際に使うのは困難が伴うということです。

既存のストライプノイズ特徴づけ

- スパース/グループスパース性 [Zheng+, T-GRS 2020] [Sun+, GRS 2020]
 - 方法: L1/混合L1,2ノルム最小化
 - 特徴: 効率的に最適化できるがストライプノイズの特徴づけとしては弱め
- 低ランク性 [Cheng+, T-GRS 2016] [Hu+, T-GRS 2021]
 - 方法: 核ノルム最小化
 - 特徴: ストライプ構造の特徴づけには適切だが特異値分解が必要で重い
- 平滑性 [Dou+, Remote Sens. 2018] [Liu+ T-GRS 2018]
 - 方法: ストライプノイズの方向に沿った全変動 (Total Variation) 最小化
 - 特徴: それなりに上手く特徴づけられるがイメージングデータに対する正則化と整合しがち

平滑というよりほぼ一定の強度より適切な特徴づけがあるのでは?

スライド 43

ストライプノイズは一定したノイズが乗ってくるケースが多い。であれば、その特性をもっと適切に特徴付ける指標があるのでは? という発想もあります。平滑性に一番近いのですが、ストライプノイズ用にもっと適切にモデルリングしようというのが大本の発想です。考え方としては非常に単純です。ストライプノイズは一方方向に差分を取ると輝度値が変わらない。その「ずっと0だろう」という平坦性を目的関数の中に組み込むときに、「滑らかだ」ぐらいの気持ちで入れるのではなく、「必ず満たせ」という必須の条件とすることが、この研究のメインアイデアです。

これまでずっとスパース性をどう利用するのかという指標の話をしてきましたが、実は最初に少し説明した制約条件(スライド 8)「適切な解がこの条件を絶対に満たす」という定式化は使ってきませんでした。なぜなら、目的関数の最小化を制約条件なしで行うことを「制約なし最適化」と言うのですが、制約条件があるケースよりも一般に簡単だと知られています。つまり条件を入れるケースは、一般的には最適化がより難しくなります。

その一方で顕著なメリットもたくさんあります。特に計測データを解析するときは、多くの場合、計測の条件や物理的な性質として「絶対これは見出してほしい」という情報があり、それを必ず満たす最適化をするためには条件として絶対に記述しなければなりません。そして、そうできるのであれば、その方がいいわけです。

提案法

線形作用素 $R(Lu) + \|s\|_1$ s.t. $Ds = 0$ $\|v - (u + s)\| \leq \epsilon$

近接写像が計算可能な関数

ストライプノイズのスパース性

計測データに対する忠実性制約

- ストライプ方向の変動がゼロという制約条件
- ストライプノイズの特徴を適切に捉える定式化 (センシング知見の反映)
- データ項を目的関数ではなく制約条件として表現
- ハイパーパラメータ調整の簡便化 (利便性)
- 計測データとの誤差を必ず一定以下に維持 (信頼性)
- 正則化指標 $R: T$ は自由に設計可能 (汎用性)
- 制約付き非可微分最適化一式変形後、主-双対近接分層法による求解 (最適性)

スライド 44

その一例がこのケースです。輝度値が 1 方向に一定であるスト

ライプノイズであれば当然この条件($Ds=0$)は満たしますので、これ($Ds=0$)を絶対に満たすよう定式化します。さらに、データ項を目的関数ではなく制約条件として表現します。前に計測データとの整合性、つまりデータ項(スライド 38)を二乗誤差として扱って、これと正則化のバランスをうまく調整するという話をしました。しかし、 λ の調整には、データをモデリングした正則化にも関係しますので、非常に手間がかかります。それをかなり簡単にする方策として、データを目的関数の中に入れるのではなく、条件として記述するというアイデアです。

具体的には、真の信号情報 u とストライプノイズ s を足したものと計測データ v との差($v-(u+s)$)はガウスノイズ n の分だけなので、その差がガウスノイズであればそのノルムは絶対に ϵ 以下になります。そして、この ϵ はガウスノイズの強度、もっと言うと標準偏差から適切な値をスピーディーに決定できるパラメータになります。

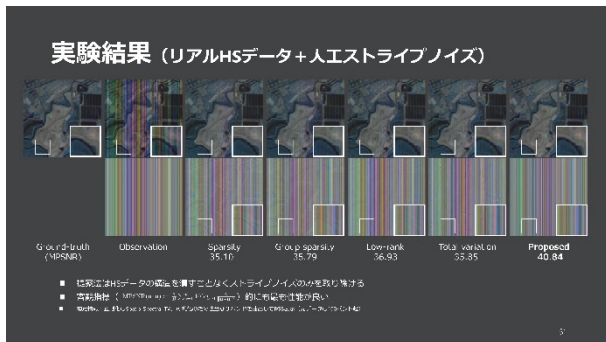
この新たな定式化の利点は二つあります。

以前の λ では正則化とデータ項の相互比率など、さまざまな要素に影響を受け、同じ強度のノイズが存在しても正則化やデータが変化すると、適切なパラメータ λ が大きく変化しました。この問題を解決すること、一つ目の利点です。パラメータの数は変わらず、ノイズの強度だけが影響を与えるため、正則化や入力データが変わっても、ノイズの強度が一定であると仮定できる場合、一度決定したパラメータを再利用できるのは大きな利点です。

二つ目の利点は、この定式化は必ず特定の条件を満たすことが保証されていることです。具体的には、計測データからは ϵ 以上離れないことが保証されています。これは科学的な解析において重要な要素で、信頼性ある結果を得るためには、得られたデータが一定の範囲内に収まっていることを保証する必要があります。この制約条件を定式化することで、その要件を満たすことができます。

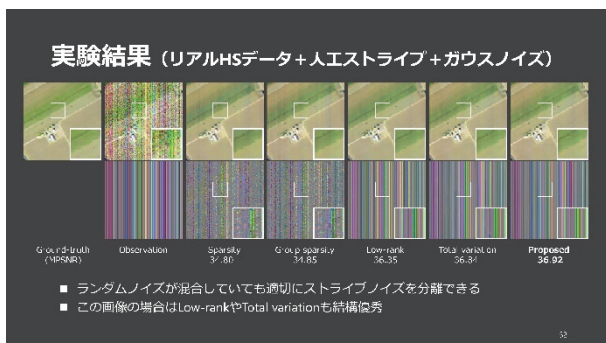
最適化が難しいとされていたため、他の手法では基本的に採用されていないアプローチですが、この研究ではこの問題を効率的に解決するためのアルゴリズムを設計しています。一見複雑に見える定式化を採用していますが、主要要素は次のとおりです。まずストライプ方向の変動が 0 という制約条件を設け、データ項を制約条件として表現しています。さらに正則化項として多様な要素が使えるような一般的な定式化を許容しています。これによりさまざまな正則化手法を試せる設計となっています。また、ストライプノイズは全画像に均一に乗っているわけではないので、スパース性も考慮しています。これらを組み合わせることで効率的なアルゴリズム構築が可能になるというのが、この論文の貢献の一つとなっています。この定式

化とアルゴリズムの詳細は、少しテクニカルになりますので省きます。



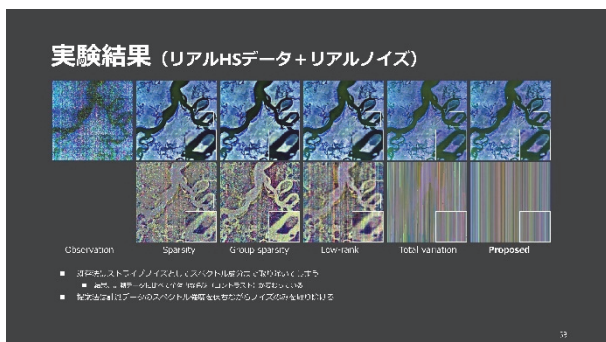
スライド 45

実際にどうい推定ができるのかという結果を示しますので、画像をご覧ください。まず技術的に生成したきれいなデータを用意しました。このデータ自体はきれいなバンドだけを技術的に抜き出してきた実際の計測データです。このデータにストライプ状のノイズを乗せて、どれくらい除去できるかを試しています。従来の手法では、画像の構造自体も一部除去されてしまいますが、提案法ではストライプだけをきれいに取ることが分かります。



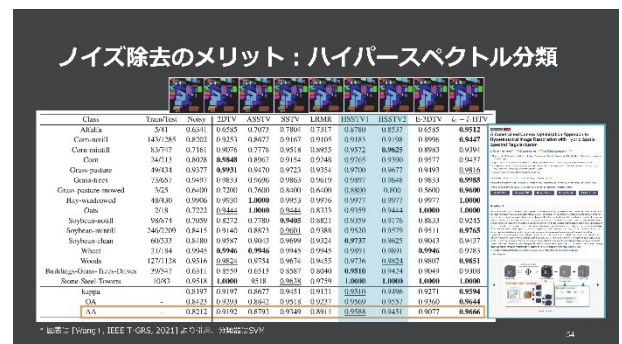
スライド 46

同様にストライプノイズ以外のノイズが乗っている場合も検証しています。同じようにストライプノイズだけをきれいに除けます。さらに、ガウスノイズについても考慮し、明示的には行われていませんが、結果としてその差分が除去されることを確認しました。



スライド 47

最後に実際のデータで考察します。この画像には、実際の衛星画像に乗っているストライプノイズとガウスノイズのようなノイズを含んでいます。実際のノイズですので、統計的な仮定が必ずしも満たされるわけではありません。しかし、提案法を使うと、かなりきれいに除去できます。これが取ったノイズです。正解データが存在しない問題のため客観的な指標では評価できませんが、実際に除去した部分、具体的には川の部分をみると、川のスペクトルの情報が従来の手法では大きく歪んでしまっているに対し、提案法だと非常に精度の高い推定ができていますことが確認できます。



スライド 48

ノイズ除去の重要性については初めに話したとおりですが、その影響を評価するための補足実験があります。具体的にはハイパースペクトルデータから地表に何が映っているのかを分類をするタスクを考えました。これは、ノイズ除去後のデータを使った解析として重要なタスクです。このタスクをノイズが乗った状態と除去した状態でい、精度の変化をさまざまに検証しました。

結果を見ると、ノイズは乗ったままのデータを用いると分類の精度は大きく低下しますが、少しでもノイズを除去すると一気に改善することが分かりました。この実験では分類器として深層学習ではなくて古典的な SVM を使用しています。SVM のような今となってはベーシックな分類器を使っても、ほぼ 100%の分類を実現しています。一方、ノイズが乗った状態で、強引に深層学習で行ってもこのように高い認識率は得られません。ノイズ除去のアプローチが非常に重要であるということが、この一例をとっても見て取れます。

ここまでの衛星画像、特に熱赤外域のハイパースペクトルに乗るストライプノイズの話でした。



スライド 49

次は画像データ以外の研究です。信号処理分野で今ホットピクになっているグラフ信号処理に関わる研究をご紹介します。今投稿中の論文でアーカイブに乗っています。さきほどとは別の博士課程学生が進めている研究テーマです。

グラフ信号処理とは

- 従来の信号処理技術を **不均一にサンプリング**されたデータにも適用できるよう拡張・一般化
- **グラフ信号モデル**
 - ノード=信号のサンプリング（計測）点
 - エッジ（重み）=サンプリング点同士の関係
 - ノード上の数値=信号値
- グラフ信号データの例：気温分布、脳波、点群、画像等

スライド 50

まずグラフ信号処理というキーワードが出てきたので、その話を少しします。皆さん、信号処理技術はご存知だと思います。フィルタリングやフーリエ変換による周波数解析、あるいはサンプリングして元に戻すナイキスト＝シャノンの定理などが古典的な信号処理として有名です。

グラフ信号処理は、不均一にサンプリングされた信号を扱うための信号処理技術です。例えば、音声や画像の信号は、データが規則的に配置されています。音声データは横軸の時間軸に沿って各時刻で規則的にデータがデジタルに取得され、画像データは画素が均等に配置されています。しかし、例えばアメリカ各地の温度計のデータなどは、温度計が配置されている位置に基づいて地理的な関係がエッジで表現され、計測点がグラフネットワークで表現されます。

各計測点に温度値が乗ると、これらの値は信号値とみなされます。しかし、この信号値は規則的に配置されているわけではなく、グラフ上に不均一に配置されています。このような信号値が乗っているグラフの構造を適切に取り入れて信号処理を行うことが、グラフ信号処理の目的です。

このような考え方が必要とされる理由は、気温分布や脳波、点群、エッジをまたぐ画像など、不均質なデータがさまざまな場面で現れるためです。そうした場合、不均一に分布し、しかもグラフ構造を持ったデータに対して、「フーリエ変換は可能なのか？ ウェーブレット解析は？ フィルタリングは？」など、さまざまな疑問が生まれます。そうした問いに答えていくのが、グラフ信号処理の研究です。

時系列グラフ信号復元と本研究の問い

- （不均一に分布したセンサで）計測された時系列データは **ノイズ・外れ値・欠損**を含む
- 計測点間の関係性（e.g., 距離）を考慮しながら復元 = **時系列グラフ信号復元**
- 従来の時系列グラフ信号復元手法[1,2]は **グラフ構造が各時刻で変化しない**と仮定

計測点（センサの位置/状態）や計測値は時間変化する → **復元に適したグラフ構造も各時刻で異なるのでは？**

スライド 51

この研究は、グラフ信号処理のモデルを使って、時系列データのノイズを除去する解析を考えています。具体的にはドローンネットワークを用いた地表リモートセンシングのシナリオを考えます。ドローンの配列は固定してもバラバラに動かしてもいいのですが、地表を測地レーザのような手段で測定し、各時刻で計測されるデータは地表の構造の変化に応じて変わる時系列データとして表現されます。一方、ドローンの位置やフォーメーションが変化すると、ドローン間の関係を表現するグラフの構造も時間方向に変化します。このように時間的に変化するグラフ信号を考えているのがこの研究です。計測されるデータには当然ノイズが乗ってきます。計測されるときに構造も、計測される信号も時間的に変化する、そこにノイズが乗ってきます。そのときにどうやってノイズを除去するかを考えています。

提案法：問題設定

観測モデル

$$\mathbf{X} = \Phi(\bar{\mathbf{X}} + \bar{\mathbf{S}} + \mathbf{N})$$

- $\mathbf{X} = [\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_T] \in \mathbb{R}^{n \times p \times T}$: n 次元 $\times p$ タイムスロットの観測データ
- $\bar{\mathbf{X}} \in \mathbb{R}^{n \times p}$: 真の時系列グラフ信号
- $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^{n \times p}$: ガウス性の加法ノイズ
- $\bar{\mathbf{S}} \in \mathbb{R}^{n \times p}$: スパースな外れ値的ノイズ
- Φ : 欠損箇所の値をゼロにする作用素

スライド 52

従来の研究の中にも時系列まで考えているものはありましたが、トポロジーは時間方向には変わらず不変であると仮定されていました。しかし、今回示したように、トポロジーが時間的に変化するケー

スも存在します。また、トポロジー自体も次元として取り入れられる方が、アプリケーションの幅が広がります。具体的には、観測モデルとして各時刻とN次元の信号がpタイムスロット分計測されるという状況を考えます。このデータは横軸に時間、縦軸に次元数を取ったマトリクスデータとして観測されます。そのデータの背後には、真の全時系列信号とスパースのような外れ値、ガウスノイズ、一部の欠損が存在します。これからこの真の時系列グラフ信号を推定します。

提案法：時系列グラフ信号復元

提案法の定式化

$$\min_{\mathbf{Y}, \mathbf{S}} \sum_{k=1}^p \mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k + \lambda R(\mathbf{D}(\mathbf{Y})) \text{ s.t. } \begin{cases} \|\mathbf{X} - \Phi(\mathbf{Y} + \mathbf{S})\|_F \leq \varepsilon \\ \|\mathbf{S}\|_1 \leq \eta \end{cases}$$

時間領域の正則化
時間方向の滑らかさ等

ガウスノイズを加味した観測データとの相合性

各時刻における頂点領域での正則化
グラフ構造に基づくグラフ信号の平滑性

- **頂点・時間領域の正則化**をおる程度自由に設計可能
→様々なセンシング知見を柔軟に反映できる (汎用性)
- データ項と外れ値成分の特徴づきを目的関数ではなく**制約条件**として表現
→計測データとの誤差を必ず一定以下に維持 (信頼性)
→ハイパーパラメータ調整の簡便化 (利便性)
- 制約付き非可微分凸最適化問題として定式化
→式変形後、主-双対近接点法による求解 (最適性)

・ $\mathbf{L}_k \in \mathbb{R}^{n \times n}$: 時刻 k のグラフラプラシアン
・ $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^{n \times p}$: 推定する時系列グラフ信号
・ $\mathbf{S} \in \mathbb{R}^{n \times p}$: 推定するスパースノイズ成分
・ $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{n \times p}$: 観測データ (ノイズを含む)
・ $\mathbf{D}$: 時間方向の差分を計算する作用素

スライド 53

例によって最適化として定式化しますが、詳細は複雑ですので、ここでは概略的な説明に留めます。多くの場合、グラフ信号は頂点領域でグラフ構造を持ち、ある程度の滑らかさを仮定できます。このため、グラフ構造を考慮した正則化と、時間方向の変化が急激にはならないという仮定に基づく時間領域での正則化を組み合わせた最適化が行われます。

細かい定義は省きますが、グラフラプラシアンはグラフ上での滑らかさをエンコードする概念で、正確にはグラフ上の差分を計算する変換をした後に、ノルムを小さくすることで滑らかさを実現します。ここ(各時刻における頂点領域での正則化)が頂点領域でのグラフが滑らかであるという表現で、ここ(時間領域の正則化)は時間方向にある程度の相関性が存在するという正則化です。

さらにデータ項を制約条件として定式化します。スパースノイズも乗っているの、L1 ノルムがある程度小さいというスパースノイズの特性も制約条件にします。制約条件にすることで、工数の増加やハイパーパラメータの調整が困難になる問題を回避しています。この最適化問題を解くことで、時系列信号を推定します。一見すると制約付きの複雑な最適化に見えますが、効率的に解くためのアルゴリズムを作ることができます。

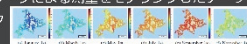
実験：目的

■ 提案法を含む様々な時系列グラフ信号復元手法に関して、以下の項目が復元に与える影響を網羅的に検証

- 静的 vs 動的グラフ
- センサーの移動速度
- 時間方向の正則化

■ 用いるデータセット

- 人工データ：ドローンネットワークによる測量をモデリングしたデータ
- 実データ：北海道の気温データ



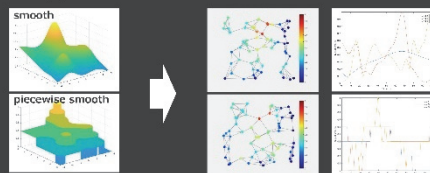
スライド 54

実際に動くのか、シミュレーションデータと実データで考えていきます。

実験：人工データの生成

- ドローンネットワークを用いた地形測量をシミュレーションしたデータ生成モデル
- 2 種類の地形 (高度は[0, 1]の範囲) を64の頂点がランダム移動しながら計測
- 各タイムスロットにおいて真のグラフ信号 $\mathbf{x}_k$ と $\mathbf{L}_k$ を生成

➢ $\mathbf{L}_k$ は $k=4$ 近接法でエッジを決定し、ガウスノイズを加えて生成



スライド 55

まず人工データについて考察します。具体的には、二つの疑似的な地形を用意し、ドローンネットワークで時々刻々と動きながらセンシングするシナリオを考えます。シミュレーションですので、ドローンはランダムにフォーメーションを変えながら、特定の点の高さを計測します。さらに計測した高さにはノイズが乗ってくる状況です。したがって、信号は時々刻々と変化して、ある点の信号の変化を時間方向にプロットすると、時間方向に滑らかに変化するパターンになります。ただし、地形が階段状になっている場合は、信号の変化も階段状のピースワイズスムース(区分的に滑らか)なパターンを示すことになります。

実験結果：人工データ (Smooth)

・ **グラフモデル**

- ・ 4x4 (時間方向の1次元)
- ・ 静的
- ・ 動的 (提案)

・ **評価指標**
PSNR (dB)

・ **計測データの欠損**

- ・ $q=0.05$ のガウスノイズ
- ・ 5%の欠損値 (4x4)の1次元分のみ生成
- ・ 5%の欠損

Methods	Regularization	Vertices	Time
(A)	None	None	$\ \mathbf{Y}\ _1$
(B)	None	None	$\ \mathbf{Y}\ _2$
(C)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(D)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(E)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(F)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(G)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(H)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(I)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(J)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None
(K)	$\mathbf{y}_k^T \mathbf{L}_k \mathbf{y}_k$	None	None

Smooth

	$\eta = 0.5$	$\eta = 0.75$
(A)	25.03	23.83
(B)	26.06	24.53
(C) [33]	17.97	18.04
(D)	22.33	22.53
(E) [16]	23.11	22.00
(F)	23.29	22.34
(G)	24.86	23.65
(H) Ours	25.89	25.04
(I)	25.22	23.99
(J) Ours	26.55	25.30
Observ.	15.89	15.91

静的なグラフを仮定している手法に比べて、グラフを動的に変化させられる手法(提案法)が様々な定式化において良い性能を達成

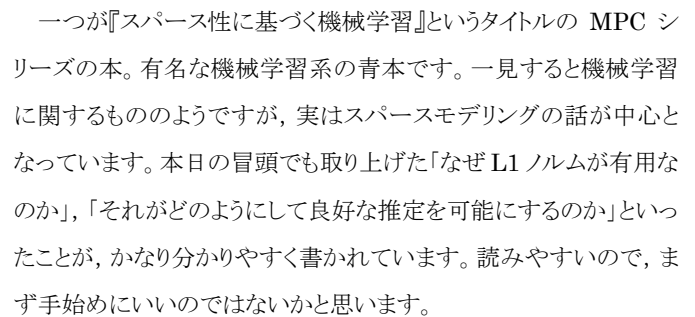
計測点が速く移動するほどグラフ構造の変化も大きい→動的な手法が相対的に強い

地形がsmoothなので時間変化もsmooth→時間方向はL2正則化が高性能

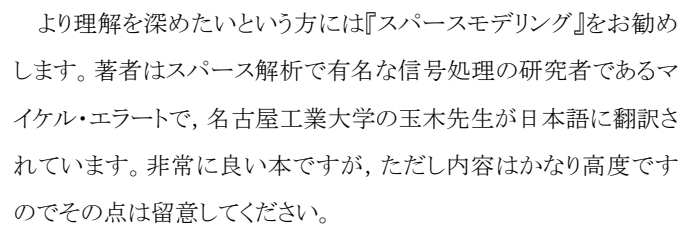
スライド 56

これらの結果に基づいて、動的なトポロジーの変化を取り入れている私たちの手法と、トポロジーは変わらないと仮定している既存の

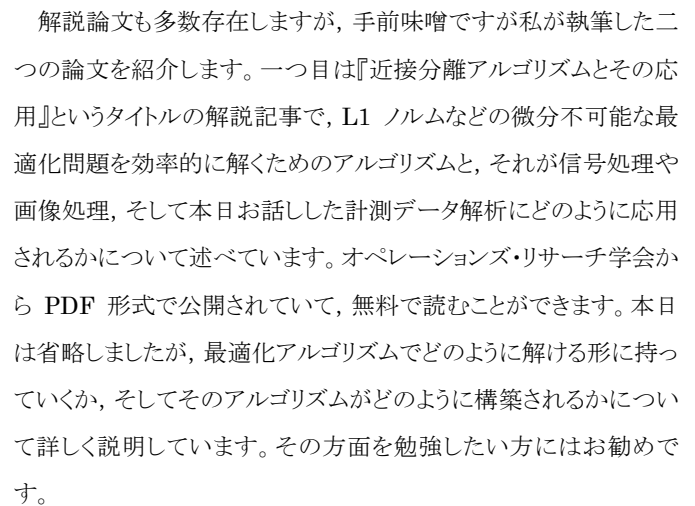
本日はスパース性にどのように利用して解析するかをスタートラインにして、最適化問題に落とし込んでいくプロセス、さらにはどう一般化するかという話、それから最近の研究事例を通じて実際の問題に対してどのような定式化を行うかについてお話ししてきました。そうしたスパース性に基づく解析の話を一から勉強したいというケースで役に立つ書籍が、日本語ではこの 2 冊ではないかと思っています。



ピースワイズのケースも同様です。この場合は、正則化が適切にピースワイズスムーズな変換変化に対応できるよう、L2からL1に変えると良いことが分かっています。



実データの方は、北海道の気温のデータです。これは計測点が動かず、トポロジーが変わらないデータですが、気温は季節によって異なる変化パターンを示します。その変化がトポロジーに一部エンコードできるため、夏や春の時期によってトポロジーがある程度変化する特性を取り入れると、推定精度が向上することが確認できました。この結果は、気温データのような不均等なデータに対しても、私たちの手法が有効であることを示しています。



二つ目は『ハイパースペクトルイメージングと最適化』というタイトルで、本日も何度か取り上げたスペクトルイメージングにおける最適化の使用について中心的に述べています。この記事は電子通信学会の解説記事ファンダムレビューに出ていて、これも無料でPDFが手に入ります。どちらかと言うとスペクトルイメージングに使う最適化の話をもっと知りたいという方向けです。

以上です。ありがとうございました。

講演者紹介



小野 峻佑（おの しゅんすけ）

2006/04-2010/03 東京工業大学 工学部情報工学科
2010/04-2012/03 // 大学院理工学研究科 集積システム専攻
修士課程
2012/04-2014/09 // 同専攻 博士課程&学振特別研究員(DC1)
2014/10-2016/03 // 像情報工学研究所 助教
2016/04-2019/03 // 科学技術創成研究院 未来産業技術研究所
助教
2016/10-2020/03 JST さきがけ研究員(情報計測領域)
2019/04-present // 情報理工学院 准教授
2021/04-present 株式会社 Ridge-i 技術顧問
2021/10-present JST さきがけ研究員(信頼される AI 領域)