スパースモデリング

―基礎から動的システムへの応用―

博士（情報学）　永原　正章　著

コロナ社

まえがき

本書はスパースモデリング（sparse modeling）の基礎とその動的システムへの応用について，わかりやすく解説した専門書である。大学の初年度に習う線形代数の知識と数値計算ソフトウェア MATLAB の使い方を知っていれば，スパースモデリングの基本的な考え方から，最新の研究成果である動的スパースモデリングの計算まで，短期間で学ぶことができるだろう。特に動的スパースモデリングに関する書籍は，世界的に見ても本書が初である。

理工系で成功するための最も重要なスキルは，情報を受信するアンテナの感度をつねに高くして，国内外でどのような理論や技術が話題になりつつあるかを捉えることである。現在，データ科学や人工知能が全世界的なブームであることは，そのようなアンテナがなくても容易にわかるだろう。しかし，もっと注意深くこのブームの背景を見てみると，スパース性に関係する技術が大きく関与していることに気付く。スパースモデリングやスパースコーディング（sparse coding），スパース最適化（sparse optimization），圧縮センシング（compressed sensing）などがスパース性に関係する技術である。アンテナ感度の高い研究者やエンジニアたちは，ブームになる前にこのような技術に着目し，いち早く自分の研究開発分野に取り込んで，先取権を獲得する。世の中の科学技術の多くはこのようにして発展してきた。スパースモデリングの産業応用はまだ始まったばかりである。ぜひ本書でスパースモデリングを勉強して，あなたの分野に新しい研究・開発の風を吹かせてほしい。

最近の人工知能の発展（第 3 次ブーム）により，人工知能はたいへん身近な存在となった。特に，音声および画像の認識や分類，ビッグデータ解析，IoT（Internet of Things）の枠組みにおけるエッジコンピューティング，フォグコンピューティングなど，まさにわれわれの周りを取り巻く環境に人工知能の技

術が自然に導入され始めている。そのような人工知能の多くは，「ものの理解」や「見える化」を目指している。いわば，超高機能なセンサを作ろうとしているといえる。一方，人工知能の分析結果を基に環境に働きかけ，スマートにものを動かすためには，超高機能なアクチュエータも欠かせない。そのための基礎理論は自動制御理論と呼ばれる。スマートなセンサ（人工知能）とスマートなアクチュエータ（自動制御）が組み合わさって初めて，スマートに動くものを作ることができる。

このような背景から，スパースモデリングと自動制御理論を組み合わせた研究が最近注目されており，これを動的スパースモデリングと呼ぶ。動的スパースモデリングでは，燃料や電力の消費，$\mathrm{CO_2}$ の排出，騒音や振動の発生など環境に悪影響を及ぼす要因を制約条件とした最適化問題として制御問題を定式化する。これらを陽に考慮した制御系を設計することが可能となり，まさに，省エネルギーを達成するための環境にやさしい自動制御理論となっている。本書で学んだ動的スパースモデリングを活用して，さまざまな環境問題を解決するヒントをぜひ得ていただきたい。

本書のおもな目標は，スパースモデリングの技術を使うことにあるので，重要ではあるが幾分難しいスパースモデリングの理論的な側面，例えばランダム行列理論を用いたスパース最適解の特徴付けや各種アルゴリズムの収束性の議論などは大きく省略した。これらの理論的な側面に興味がある方は，各章の終わり（5 章を除く）の「さらに勉強するために」と題された節で挙げられている文献にチャレンジしてほしい。

本書の構成は下記のとおりである。

- スパース性とは何か（1 章）··· 最初の章では，スパース性の数学的な定義を述べる。本書を通じて大切な章である。
- 曲線フィッティングで学ぶスパースモデリング（2 章）··· データからの曲線フィッティングを題材に最小二乗法や正則化，ℓ^1 最適化などを学ぶ。また，これらの最適化問題を解くための MATLAB の使い方もここで解説する。

- 凸最適化アルゴリズム（3 章）··· スパースモデリングで重要な技術である凸最適化のアルゴリズムを解説する。
- 貪欲アルゴリズム（4 章）··· スパースモデリングで凸最適化と並んで重要な貪欲アルゴリズムについて解説する。
- スパースモデリングの歴史（5 章）··· コーヒーブレイクとしてスパースモデリングの歴史について振り返る。省略可能。
- 動的システムと最適制御（6 章）··· 動的スパースモデリングに必要な動的システムと最適制御の基礎について勉強する。
- 動的スパースモデリング（7 章）··· 動的システムに対するスパースモデリング（動的スパースモデリング）の基礎を勉強する。
- 動的スパースモデリングのための数値最適化（8 章）··· 動的スパースモデリングの最適化問題を解くための数値最適化手法について示す。

本書の一つの特徴は，スパースモデリングを実際に試してみるための MATLAB コードを掲載していることである。本書を読み進めるとともに，MATLAB でいろいろな数値例題を試してみることで，スパースモデリングの深い理解が可能になる。

本書に掲載している MATLAB コードや追加情報については以下のサポートページを参照してほしい。

https://nagahara-masaaki.github.io/spm.html

本書の内容は，科研費新学術領域「スパースモデリングの深化と高次元データ駆動科学の創成」や計測自動制御学会（SICE）「モデルベースト制御における機械学習とダイナミクスの融合」調査研究会，ひびきの AI 社会実装研究会などでのセミナーや交流会，また多くの研究者・エンジニアとのディスカッションで勉強させていただいた内容が多く含まれている。また，本書の内容の一部（特に 6 章以降）は JSPS 科研費 15H02668 および 16H01546 の助成を受けた研究成果に基づいている。

九州工業大学名誉教授の石川真澄先生には，ニューラルネットワークについての先生のご研究に関する文献と貴重なコメントをいただいた。大阪大学工学研

究科の林直樹先生と株式会社 IHI の濱口謙一氏，また京都大学情報学研究科の藤本悠介氏には，本書の草稿について詳細なコメントをいただいた。京都大学病院の藤本晃司先生からは MRI に関して貴重なコメントをいただいた。コロナ社には本書の出版にあたりたいへんお世話になった。本書の執筆・出版を支えていただいた多くの方々に感謝の意を表したい。

2017 年 9 月

著　　者

目　　　次

1.　スパース性とは何か

2.　曲線フィッティングで学ぶスパースモデリング

3.　凸最適化アルゴリズム

4.　貪欲アルゴリズム

5.　スパースモデリングの歴史

6.　動的システムと最適制御

7.　動的スパースモデリング

8.　動的スパースモデリングのための数値最適化

1 スパース性とは何か

本章では，有限次元のベクトルのスパース性を数学的に定式化する。本書を通じて，本章で説明する概念が重要となるので，しっかり勉強していただきたい。

本書では，有限次元のベクトル（有限次元空間上に矢印として書けるベクトル）を太文字で $\boldsymbol{x}$ などと書くことにする。ただし，1 次元ベクトルはスカラと同一視し，太文字では書かない。有限次元のベクトルは列ベクトル（縦ベクトル）であり

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \tag{1.1}$$

のように表現する。ただし，本文中で有限次元ベクトルを書く場合は

$$\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, x_3) \tag{1.2}$$

のように丸括弧で横書きする場合もあるが，これは縦ベクトル (1.1) に読み替えていただきたい。ベクトル $\boldsymbol{x}$ の転置を $\boldsymbol{x}^\top$ で表す。また，n 次元実ベクトル空間（n 次元の列ベクトルの空間）を $\mathbb{R}^n$ で表す。

1 章の要点

- スパースモデリングでは冗長な辞書（ベクトルの集合）を考える。
- スパースモデリングでは，冗長な辞書から最も少ないベクトルを選んで信号を表現する（ℓ^0 最適化）。
- ℓ^0 最適化問題の総当り法による解法は，問題のサイズが大きくなれば指数関数的に計算量が増大する。

1.1　冗長な辞書とスパース性

3 次元空間 $\mathbb{R}^3$ を考えよう。$\mathbb{R}^3$ の**標準基底**（standard basis）は

$$\boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{1.3}$$

である。この標準基底 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3\}$ を用いて，任意の 3 次元ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^3$ は

$$\boldsymbol{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = y_1\boldsymbol{e}_1 + y_2\boldsymbol{e}_2 + y_3\boldsymbol{e}_3 \tag{1.4}$$

と書くことができる。一般には，$\mathbb{R}^3$ から独立な 3 本のベクトル $\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \boldsymbol{\phi}_3$ を持ってくれば，それらは $\mathbb{R}^3$ の基底となる。すなわち，任意の $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^3$ に対して，ある実数 $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ が一意に存在して

$$\boldsymbol{y} = \beta_1\boldsymbol{\phi}_1 + \beta_2\boldsymbol{\phi}_2 + \beta_3\boldsymbol{\phi}_3 \tag{1.5}$$

と表現できる。もし，$\boldsymbol{\phi}_1$，$\boldsymbol{\phi}_2$，$\boldsymbol{\phi}_3$ が長さ 1 で互いに直交する**正規直交基底**（orthonormal basis）ならば，すなわち

$$\boldsymbol{\phi}_i^\top \boldsymbol{\phi}_j = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}, \quad i, j = 1, 2, 3 \tag{1.6}$$

が成り立てば

$$\beta_i = \boldsymbol{\phi}_i^\top \boldsymbol{y}, \quad i = 1, 2, 3 \tag{1.7}$$

として，係数 β_1, β_2, β_3 が求まる。

演習問題 1.1　ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^3$ と正規直交とは限らない基底 $\boldsymbol{\phi}_1$, $\boldsymbol{\phi}_2$, $\boldsymbol{\phi}_3$ が与えられたとき，表現 (1.5) の係数 β_1, β_2, β_3 を求めよ。

$\mathbb{R}^3$ の基底として

$$\boldsymbol{\phi}_1 = \boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi}_2 = \boldsymbol{e}_2 + \boldsymbol{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\phi}_3 = \boldsymbol{e}_3 + \boldsymbol{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{1.8}$$

を考えよう。これと標準基底 (1.3) とを合わせて，ベクトルの組 $\{\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3, \boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \boldsymbol{\phi}_3\}$ を作る。**図 1.1** にこれら 6 本のベクトルを示す。これら 6 本のベクトルを用いて，3 次元ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^3$ を

$$\boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{3} \alpha_i \boldsymbol{e}_i + \sum_{i=1}^{3} \beta_i \boldsymbol{\phi}_i \tag{1.9}$$

と表現したとしよう。これは明らかに冗長な表現であり，式 (1.9) を満たす係数 α_i, β_i $(i = 1, 2, 3)$ の組合せは無数に存在する。例えば，$\boldsymbol{y} = (y_1, y_2, y_3)$ のとき，自明な一つの解として

$$(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (y_1, y_2, y_3), \quad (\beta_1, \beta_2, \beta_3) = (0, 0, 0) \tag{1.10}$$

がある。

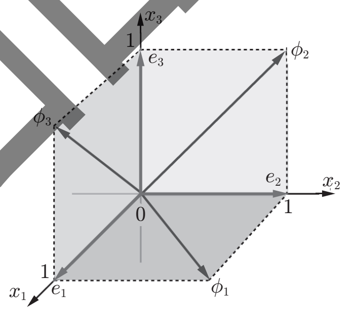

図 1.1 $\mathbb{R}^3$ の 6 本のベクトル $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3, \boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \boldsymbol{\phi}_3$

いま，非ゼロの係数を記憶するためのメモリがきわめて高価で，なるべく多くの係数を 0 にしたいという状況を考えよう。この状況の下で，ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^3$ が二つのベクトル $\boldsymbol{e}_1$ と $\boldsymbol{\phi}_2$ の張る平面上にあるとしよう。すると，α_1 と β_2 以外の係数をすべて 0 にして

$$\boldsymbol{y} = \alpha_1 \boldsymbol{e}_1 + \beta_2 \boldsymbol{\phi}_2 \tag{1.11}$$

という表現が可能となる。すなわち自明な係数 (1.10) よりも非ゼロの係数が少ない表現が得られたことになる。三つの非ゼロ要素が二つに減っただけでは，あまりご利益はないと思われるかもしれない。しかし，例えば 10 万次元のベクトルが 100 本のベクトルだけで表現できたとすると，大幅なデータ圧縮が可能となる。

以上の考察を一般化してみよう。m 次元のベクトル空間 $\mathbb{R}^m$ を考える。そこに，次元よりも多いベクトル $\{\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \cdots, \boldsymbol{\phi}_n\}$ を導入し（ただし，$m < n$），ベクトル $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ に対して

$$\boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \boldsymbol{\phi}_i \tag{1.12}$$

を満たす係数 $\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n$ を求めたいとしよう。ただし，ベクトル $\boldsymbol{\phi}_i$ のうち m 本は 1 次独立であるとする。このようなベクトルの組 $\{\boldsymbol{\phi}_1, \boldsymbol{\phi}_2, \cdots, \boldsymbol{\phi}_n\}$ を**辞書**（dictionary）と呼ぶ。いまの場合，辞書のサイズ n はベクトル $\boldsymbol{y}$ の次元 m よりも大きい。このような辞書を**冗長な辞書**（redundant dictionary）と呼ぶ。

行列 Φ とベクトル $\boldsymbol{x}$ を

$$\Phi \triangleq \begin{bmatrix} \boldsymbol{\phi}_1 & \boldsymbol{\phi}_2 & \ldots & \boldsymbol{\phi}_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \boldsymbol{x} \triangleq \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n \tag{1.13}$$

と定義すると，式 (1.12) の等式は

$$\boldsymbol{y} = \Phi \boldsymbol{x} \tag{1.14}$$

と簡単に書くことができる。いま，冗長な辞書による表現を考えているため，行列 Φ は横長の行列となっていることに注意する。スパースモデリングでは，このような横長の行列による連立方程式が考察の対象となる。

ベクトル $\boldsymbol{\phi}_i \in \mathbb{R}^m$ のうち m 本は 1 次独立であると仮定したので，行列 Φ は**フルランク**（full rank）である。ここで，行列 $\Phi \in \mathbb{R}^{m \times n}$ がフルランクであるとは

$$\mathrm{rank}(\Phi) = \min(m, n) \tag{1.15}$$

が成り立つことである。このとき，任意の $\boldsymbol{y} \in \mathbb{R}^m$ に対して，線形方程式 (1.14) を満たす $\boldsymbol{x}$ は少なくとも一つ存在する。その解の一つを $\boldsymbol{x}_0$ としよう。つぎに行列 Φ の**零化空間**（null space）または**カーネル**（kernel）を

$$\ker(\Phi) \triangleq \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n : \Phi\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}\} \tag{1.16}$$

で定義する。この $\ker(\Phi)$ は線形空間（すなわち，原点を通る n 次元空間の超平面）である。線形代数の次元定理[†]により，$\ker(\Phi)$ の次元は $n - m$ となり，$n > m$ であるので，$\ker(\Phi)$ の元は無数にある。その元 $\boldsymbol{z} \in \ker(\Phi)$ を用いれば，線形方程式 (1.14) の一般解は

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{z}, \quad \boldsymbol{z} \in \ker(\Phi) \tag{1.17}$$

と表現できる。これより，方程式 (1.14) を満たす $\boldsymbol{x}$ は無数に存在することがわかる。

演習問題 1.2　式 (1.17) のベクトル $\boldsymbol{x}$ が方程式 (1.14) の解であることを示せ。

無数に存在する解の中から非ゼロの係数が最も少ないもの，言い換えれば**最もスパースなもの**を選ぶのがスパースモデリングの基本問題である。次節以降でこの問題を定式化しよう。

1.2　ℓ^0 ノルムの定義と意味

ここでは，有限次元ベクトルのノルムについて復習し，スパース性を定式化

† **次元定理**（dimension theorem）：行列 $\Phi \in \mathbb{R}^{m \times n}$ に対して，$\ker(\Phi)$ の次元と Φ の階数 $\mathrm{rank}(\Phi)$ を足すと n になる。

索　　　引

—— 著 者 略 歴 ——

愛媛県生まれ。2003 年，京都大学大学院情報学研究科博士課程修了。博士（情報学）。京都大学助手，助教，講師を経て，2016 年より北九州市立大学環境技術研究所教授。また，同年よりインド工科大学ムンバイ校（IIT Bombay）の客員教授を兼任。専門は自動制御と人工知能。2012 年，IEEE 制御システム部門より国際賞である Transition to Practice Award を受賞。同賞の受賞は日本人初である。そのほか，計測自動制御学会や電子情報通信学会の論文賞など，受賞多数。IEEE の上級会員（Senior Member）。著書に「マルチエージェントシステムの制御」（コロナ社，共著）などがある。

スパースモデリング —— 基礎から動的システムの応用 ——

Sparse Modeling —— Fundamentals and Its Applications to Dynamical Systems ——

2017 年 10 月 31 日　初版第 1 刷発行　★

検印省略

著　者　永原（ながはら）正章（まさあき）
発 行 者　株式会社　コ ロ ナ 社
　　　　　代 表 者　牛 来 真 也
印 刷 所　三 美 印 刷 株 式 会 社
製 本 所　有限会社　愛 千 製 本 所

112–0011　東京都文京区千石 4–46–10
発 行 所　株式会社　コ ロ ナ 社
CORONA PUBLISHING CO., LTD.
Tokyo Japan
振替 00140–8–14844・電話(03)3941–3131(代)
ホームページ　http://www.coronasha.co.jp

ISBN 978–4–339–03222–2　C3053　Printed in Japan　（横尾）