



ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΤΟΜΕΑΣ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ

Τεχνικές Μηχανικής Μάθησης για Αντίστροφα
Προβλήματα

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

της

ΑΓΑΠΗΣ ΜΑΡΙΑΣ ΡΙΣΣΑΚΗ

Επιβλέπων: Δημήτριος Φωτάκης
Αναπληρωτής Καθηγητής Ε.Μ.Π.

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΛΟΓΙΚΗΣ ΚΑΙ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΩΝ
Αθήνα, Ιούνιος 2020



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
Τομέας Τεχνολογίας Πληροφορικής και Υπολογιστών
Εργαστήριο Λογικής και Επιστήμης Υπολογισμών

Τεχνικές Μηχανικής Μάθησης για Αντίστροφα Προβλήματα

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

της

ΑΓΑΠΗΣ ΜΑΡΙΑΣ ΡΙΣΣΑΚΗ

Επιβλέπων: Δημήτριος Φωτάκης
Αναπληρωτής Καθηγητής Ε.Μ.Π.

Εγκρίθηκε από την τριμελή εξεταστική επιτροπή την 29η Ιουνίου 2020.

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

(Υπογραφή)

.....
Δημήτριος Φωτάκης
Αναπληρωτής Καθηγητής
Ε.Μ.Π.

.....
Αριστείδης Παγουρτζής
Αναπληρωτής Καθηγητής
Ε.Μ.Π.

.....
Γιώργος Στάμου
Αναπληρωτής Καθηγητής
Ε.Μ.Π.

Αθήνα, Ιούνιος 2020

(Υπογραφή)

.....
ΑΓΑΠΗ ΜΑΡΙΑ ΡΙΣΣΑΚΗ

Διπλωματούχος Ηλεκτρολόγος Μηχανικός και Μηχανικός Υπολογιστών Ε.Μ.Π.

© 2020 – All rights reserved



Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Σχολή Ηλεκτρολόγων Μηχανικών και Μηχανικών Υπολογιστών
Τομέας Τεχνολογίας Πληροφορικής και Υπολογιστών
Εργαστήριο Λογικής και Επιστήμης Υπολογισμών

Copyright ©–All rights reserved Αγάπη Μαρία Ρισσάκη, 2020.

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος.

Απαγορεύεται η αντιγραφή, αποθήκευση και διανομή της παρούσας εργασίας, εξ ολοκλήρου ή τμήματος αυτής, για εμπορικό σκοπό. Επιτρέπεται η ανατύπωση, αποθήκευση και διανομή για σκοπό μη κερδοσκοπικό, εκπαιδευτικής ή ερευνητικής φύσης, υπό την προϋπόθεση να αναφέρεται η πηγή προέλευσης και να διατηρείται το παρόν μήνυμα. Ερωτήματα που αφορούν τη χρήση της εργασίας για κερδοσκοπικό σκοπό πρέπει να απευθύνονται προς τον συγγραφέα.

Ευχαριστίες

Θα ήθελα να ευχαριστήσω τον επιβλέποντα καθηγητή μου κ.Δημήτρη Φωτάκη για την εμπιστοσύνη και τη καθοδήγηση. Είμαι ευγνώμων στους ανθρώπους που ήταν δίπλα μου κατά τη διάρκεια της διεκπόνησης (μετ' εμποδίων) της παρούσας εργασίας και ειδικά τη Χριστίνα, την Άντα και τον Νίκο.

Περίληψη

Μελετάμε την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων σε μία οικογένεια μονοδιάστατων αστρονομικών σημάτων που ονομάζονται Spectral Energy Distributions (SEDs). Γενικώς, αντίστροφα προβλήματα ονομάζουμε εκείνα στα οποία στοχεύουμε στην ανακατασκευή ή «διόρθωση» σημάτων από ελλιπή ή/και θορυβώδη πληροφορία. Τέτοια προβλήματα έχουν μελετηθεί εκτενώς στην βιβλιογραφία αλλά σχεδόν αποκλειστικά για σήματα εικόνων, τα οποία παρουσιάζουν βολικές ιδιότητες (π.χ. τοπικότητα). Οι μέθοδοι που μας αφορούν περιλαμβάνουν είτε κυρτή βελτιστοποίηση με δομικούς περιορισμούς είτε τεχνικές μηχανικής μάθησης με νευρωνικά δίκτυα, και πιο συγκεκριμένα γενετικά μοντέλα (π.χ. Generative Adversarial Networks ή GANs). Η βασική μας συνεισφορά συνίσταται στην επέκταση ορισμένων εκ των μεθόδων που περιλαμβάνουν μηχανική μάθηση με νευρωνικά δίκτυα για την περίπτωση των σημάτων SEDs. Πιο συγκεκριμένα, πραγματοποιούμε προτυποποίηση των μεθόδων που κάνουν χρήση γενετικών μοντέλων σε SEDs, ενώ διαχειριζόμαστε προβλήματα που αφορούν το robustness των μεθόδων καθώς και την κατασκευή και αξιολόγηση των ίδιων των γενετικών μοντέλων.

Λέξεις Κλειδιά

αντίστροφα προβλήματα, SEDs, νευρωνικά δίκτυα, γενετικά μοντέλα, GANs, GLO

Abstract

We study inverse problems for a family of 1-dimensional astronomical data, namely Spectral Energy Distributions (SEDs). In general, inverse problems are the ones where our goal is to reconstruct or correct a signal given an incomplete and/or noisy version. Such problems have been studied thoroughly almost exclusively for images, which possess useful properties (e.g. locality). We focus on methods which involve either convex optimization with structural constraints or machine learning techniques with artificial neural networks, in particular generative models (e.g. Generative Adversarial Networks $\hat{\gamma}$ GANs). Our main contribution is the extension of the machine learning methods for inverse problems which utilize neural networks for the family of SED signals. More specifically, we focus on prototyping the methods that involve generative models for the particular case of SEDs. Additionally, we tackle challenges regarding the robustness of those methods as well as the construction and evaluation of the required generative models.

Keywords

inverse problems, SEDs, neural networks, generative models, GANs, GLO

Περιεχόμενα

Ευχαριστίες	1
Περίληψη	3
Abstract	5
Περιεχόμενα	8
Κατάλογος Σχημάτων	10
1 Εισαγωγή	11
1.1 Οργάνωση της διπλωματικής εργασίας	13
2 Αντίστροφα Προβλήματα και Κλασσικές Προσεγγίσεις	15
2.1 Εισαγωγή	15
2.2 Τι ονομάζουμε Αντίστροφο Πρόβλημα;	15
2.3 Φορμαλισμός	15
2.4 Κλασσικές Προσεγγίσεις Επίλυσης	16
2.4.1 Υπόθεση «αραιού» σήματος	17
2.4.2 Η θορυβώδης περίπτωση	21
2.5 Αντίστροφα Προβλήματα σε Πραγματικά Σήματα	26
2.5.1 Ορθοκανονικές Βάσεις και Αραιές Αναπαραστάσεις	27
2.5.2 Συμπίεση Σημάτων	27
3 Μηχανική Μάθηση, Νευρωνικά Δίκτυα και Γενετικά Μοντέλα	31
3.1 Εισαγωγή	31
3.2 Περί Τεχνικών Μηχανικής Μάθησης	31
3.3 Νευρωνικά Δίκτυα: Δομή και Εκπαίδευση	32
3.3.1 Αλγόριθμος Εκπαίδευσης ενός Νευρωνικού Δικτύου.	34
3.4 Αρχιτεκτονική Νευρωνικών Δικτύων	35
3.5 Σύγχρονα Γενετικά Μοντέλα	37
3.6 Η Μηχανική Μάθηση ως Αντίστροφο Πρόβλημα	41

4	Χρησιμοποιώντας Νευρωνικά Δίκτυα σε Αντίστροφα Προβλήματα	43
4.1	Εισαγωγή	43
4.2	Διαφορετικές Προσεγγίσεις	43
4.2.1	Μέθοδοι που βασίζονται σε Γενετικά Μοντέλα	43
4.2.2	Μέθοδοι που βασίζονται σε Δομικούς Περιορισμούς μέσω Νευρωνικών Δικτύων	44
4.2.3	Υβριδικές Μέθοδοι	45
4.3	Θεωρητική Ανάλυση	46
4.3.1	Πότε ισχύουν οι συνθήκες για επιτυχή ανάκτηση;	49
5	Πειραματικό Μέρος: Εφαρμογή των Μεθόδων σε Αστρονομικά Δεδομένα	59
5.1	Εισαγωγή	59
5.2	Δεδομένα και Προβλήματα Ενδιαφέροντος	59
5.3	Σχεδιασμός Πειραμάτων	61
5.3.1	Κατασκευή Γενετικών Μοντέλων	61
5.3.2	Επίλυση Αντίστροφων Προβλημάτων	62
5.3.3	Μέθοδοι Αξιολόγησης	63
5.4	Αποτελέσματα	63
	Βιβλιογραφία	70

Κατάλογος Σχημάτων

2.1	Οπτικοποίηση του κώνου στις δύο διαστάσεις. Σκιαγραφείται η περιοχή $\mathbb{C}(\{0\})$ για $z = [z_0, z_1]^T$	18
2.2	Οπτικοποίηση της ιδιότητας της ισχυρής κυρτότητας. Η αρχική εικόνα προέρχεται από το [41].	24
2.3	Η συσχέτιση μεταξύ της αραιής αναπαράστασης ενός σήματος και του φορμαλισμού του compressed sensing.	30
3.1	Ανατομία του νευρώνα.	33
3.2	Απλή δομή ενός νευρωνικού δικτύου δύο «χρυφών» επιπέδων.	34
3.3	Autoencoder	36
3.4	Οπτικοποίηση ενός γενετικού μοντέλου.	37
3.5	Διαδικασία εκπαίδευσης ενός GAN	40
3.6	Γενετικό μοντέλο που έχει εκπαιδευτεί με την διαδικασία Generative Latent Optimization	40
5.1	Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στο reconstruction, ώστε να αξιολογηθεί η ικανότητα αντιστροφής του γενετικού μοντέλου. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.	64
5.2	Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στο inpainting. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα, με πράσινο είναι το παράθυρο που λείπει και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.	64
5.3	Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στο super-resolution. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα, με πράσινο είναι οι τιμές που λείπουν και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.	65
5.4	Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στα δεδομένα εκπαίδευσης. (a) reconstruction (b) inpainting (c) super-resolution. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα, με πράσινο είναι οι τιμές που λείπουν και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.	65
5.5	Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο denoising. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά επίπεδα θορύβου.	67

- 5.6 Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο inpainting. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας (υπό μορφή παραθύρου). Παρουσιάζουμε την απόδοση της μεθόδου ανακατασκευής στην περίπτωση της προβολής της κωδικοποίησης στην μοναδιαία μπάλα (καφέ) και στην περίπτωση της εφαρμογής regularization (πράσινο). 68
- 5.7 Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο inpainting. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο δύο σύνολα 100 σημάτων, από τα test data και από τα training data, στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας (υπό μορφή παραθύρου). Παρουσιάζουμε την απόδοση της μεθόδου ανακατασκευής για τα test data (καφέ) και για τα training data (πράσινο). . . 68
- 5.8 Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο super-resolution. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας (υπό μορφή τυχαίων μετρήσεων). 69
- 5.9 Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο compressed sensing. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικό πλήθος μετρήσεων. 69

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Στην παρούσα εργασία εξετάζουμε διεξοδικά σύγχρονες μεθόδους για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων, τα οποία αποτελούν το σύνολο των προβλημάτων όπου από περιορισμένες μετρήσεις/μερική πληροφορία που λαμβάνονται για κάποιο πραγματικό σήμα επιχειρείται η ανακατασκευή του σήματος αυτού στην ολότητά του. Κάθε μέθοδος που λύνει ένα τέτοιο πρόβλημα χρησιμοποιεί κάποια πρότερη γνώση (prior) που αφορά την δομή του σήματος, έτσι ώστε να γενικεύσει την ελλιπή πληροφορία σε μία εκτίμηση του σήματος το οποίο αυτή αφορά. Τα προβλήματα αυτά είναι ιδιαίτερα ρεαλιστικά και αφορούν μηχανικούς, καθώς η λήψη δειγμάτων ή διάσπαρτων πληροφοριών είναι συνήθης πρακτική για την παρακολούθηση ενός φαινομένου. Για παράδειγμα, η λήψη μετρήσεων από ένα σύνολο αισθητήρων σε ένα χώρο μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την εκτίμηση ιδιοτήτων όπως η θερμοκρασία ή η υγρασία σε κάθε σημείο του χώρου αυτού, θεωρώντας ως δομική ιδιότητα μία ομοιογένεια στον χώρο ως προς τις ιδιότητες αυτές.

Πιο συγκεκριμένα, οι μέθοδοι που εξετάζουμε είναι κλασικές, οι οποίες χαρακτηρίζονται γενικώς ως κυρτή βελτιστοποίηση με περιορισμούς [14, 15, 18], και σύγχρονες, που εμπλέκουν μηχανική μάθηση με νευρωνικά δίκτυα [12, 50]. Οι μέθοδοι και των δύο κατηγοριών έχουν μελετηθεί εκτενώς σε θεωρητικό επίπεδο σχετικά με τις εγγυήσεις που προσφέρουν. Επιπλέον, σε πειραματικό επίπεδο η επίδοση των μεθόδων έχει εξεταστεί στη βιβλιογραφία κυρίως για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων για εικόνες. Το πιο θεμελιώδες από αυτά ονομάζεται compressed sensing και συνίσταται στην ανακατασκευή ενός σήματος από ένα μικρό πλήθος γραμμικών μετρήσεων. Το compressed sensing είναι γενικό πρόβλημα που μοντελοποιεί πραγματικά προβλήματα, πολλά εκ των οποίων αφορούν σήματα εικόνων π.χ. MRI scan και single pixel camera. Μερικά πιο απλά αντίστροφα προβλήματα εικόνων, τα οποία έχουν χρησιμοποιηθεί για την αξιολόγηση κυρίως των σύγχρονων μεθόδων, είναι η συμπλήρωση ενός μέρους της εικόνας που λείπει (inpainting), η αύξηση της ανάλυσης της εικόνας (super-resolution) και ο καθαρισμός της εικόνας από προσθετικό θόρυβο μικρής ενέργειας (denoising).

Στην περίπτωση μας, η ενασχόληση με αυτές τις μεθόδους αφορμάται από μία διαφορετική εφαρμογή που αφορά την επίλυση πραγματικών αντίστροφων προβλημάτων για μία συγκεκριμένη οικογένεια αστρονομικών σημάτων που ονομάζονται Spectral Energy Distributions (SEDs). Οι SEDs αποτελούν μονοδιάστατα σήματα που προκύπτουν από μετρήσεις ενέργειας

σε συγκεκριμένα μήκη κύματος και χαρακτηρίζουν ένα ουράνιο αντικείμενο. Τα αντίστροφα προβλήματα προκύπτουν με φυσικό τρόπο για τέτοιου είδους σήματα: Αρχικά, η λήψη των μετρήσεων γίνεται από τηλεσκοπία σε συγκεκριμένα μήκη κύματος επομένως ο συνδυασμός μετρήσεων διαφορετικών τηλεσκοπίων και η συμπλήρωση ελλείψεων στις μετρήσεις είναι ένα σημαντικό πρόβλημα για την διαμόρφωση μίας πλήρους SED που χαρακτηρίζει ένα ουράνιο αντικείμενο. Συγχρόνως, η διαδικασία λήψης των μετρήσεων εισάγει θόρυβο και ελλείψεις στις μετρήσεις λόγω φαινομένων όπως επίδραση της ατμόσφαιρας, κοσμικές ακτίνες κ.α. Επιπλέον, τα σήματα αυτά παρουσιάζουν ειδικές δυσκολίες σε σχέση με τις εικόνες για τους ακόλουθους λόγους: Πρώτον, εμφανίζουν ακραίες τιμές που πρέπει να διαχειριστούν οι μέθοδοι εμφανίζοντας σχετικό *robustness*. Δεύτερον, δεν εμφανίζουν ιδιότητες τοπικότητας και περιοδικότητας που θα μπορούσε κανείς να αξιοποιήσει ώστε να κατασκευάσει μία βολική αναπαράσταση (όπως είναι σχετικοί μετασχηματισμοί π.χ. Fourier για τις εικόνες), επομένως οι μέθοδοι οφείλουν να είναι γενικές. Και τέλος, δεν μπορεί να αξιολογηθεί η ποιότητα μίας εκτίμησης από έναν παρατηρητή, όπως συμβαίνει με την ποιοτική μελέτη πάνω σε επεξεργασία εικόνων.

Καταλήγοντας, κίνητρο για την εκπόνηση της παρούσας εργασίας είναι οι ανάγκες που περιγράφηκαν παραπάνω για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων για SEDs καθώς και η επιθυμία για σφαιρική μελέτη των μεθόδων επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων που κυριαρχούν στη σύγχρονη βιβλιογραφία. Σε αυτό το σημείο θα πρέπει να τονιστεί ότι η μελέτη μας αφορά από ένα σύνολο μεθόδων της σύγχρονης βιβλιογραφίας που αφορά την επίλυση ρεαλιστικών αντίστροφων προβλημάτων σε εικόνες με συνήθεις ιδιότητες (π.χ. τοπικότητα). Πιο συγκεκριμένα, οι μέθοδοι διαχωρίζονται σε δύο τάσεις:

1. Η πρώτη τάση περιλαμβάνει μεθόδους [12] που βασίζονται σε γενετικά μοντέλα (π.χ. [11, 24, 35, 36]), δηλαδή υπολογιστικές δομές που «μαθαίνουν» (μέσα από διαφορετικές διαδικασίες εκπαίδευσης) μία γενική αναπαράσταση για κάποιο υποσύνολο των εικόνων με συνήθεις ιδιότητες. Αυτά τα μοντέλα επιτρέπουν την αποδοτική αναζήτηση λύσεων για ένα αντίστροφο πρόβλημα εντός του πεδίου αναπαράστασής τους. Η βασική προϋπόθεση για αυτές τις μεθόδους είναι η κατασκευή και αξιολόγηση γενετικών μοντέλων. Στην περίπτωση των εικόνων η σύγχρονη έρευνα μας έχει δώσει αρκετά παραδείγματα πετυχημένων γενετικών μοντέλων, τα οποία ωστόσο αξιολογούνται κυρίως εμπειρικά.
2. Η δεύτερη τάση περιλαμβάνει μεθόδους [48, 50] που χρησιμοποιούν κατάλληλα επιλεγμένα νευρωνικά δίκτυα ώστε να χαρακτηρίσουν την ίδια τη δομή των εικόνων με συνήθεις ιδιότητες. Σε αυτή την περίπτωση χρησιμοποιούνται υποθέσεις που αφορούν την ικανότητα συγκεκριμένων νευρωνικών δικτύων να προσεγγίζουν καλά τις εικόνες με συνήθεις ιδιότητες ([26]).

Ωστόσο, στην παρούσα εργασία τα δεδομένα που μας αφορούν δεν είναι εικόνες με συνήθεις ιδιότητες, που έχουν μελετηθεί εκτενώς, αλλά τα αστρονομικά σήματα τύπου SEDs. Επιχειρούμε να εφαρμόσουμε μεθόδους της πρώτης κατηγορίας που προϋποθέτουν πετυχημένα γενετικά μοντέλα καθώς δεν έχουμε ενδείξεις για συγκεκριμένα νευρωνικά δίκτυα που ικανοποιούν αντίστοιχες δομικές ιδιότητες τις οποίες θα αξιοποιούσαμε σε μία μέθοδο της

δεύτερης κατηγορίας. Φυσικά, η απόκτηση των πετυχημένων γενετικών μοντέλων για SEDs παρουσιάζει ενδιαφέρουσες δυσκολίες σχετικά με την διαδικασία κατασκευής καθώς και με την αξιολόγηση. Τα παραπάνω σημεία πραγματεύεται λεπτομερώς η παρούσα εργασία.

1.1 Οργάνωση της διπλωματικής εργασίας

Το περιεχόμενο της παρούσας εργασίας οργανώνεται σε τέσσερα βασικά κεφάλαια:

1. Στο κεφάλαιο 2 γίνεται αναλυτική μελέτη των κλασικών μεθόδων κυρτής βελτιστοποίησης με περιορισμούς για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων. Η ανάλυση επικεντρώνεται στο compressed sensing και στις εγγυήσεις επίλυσής του σε συγκεκριμένες περιπτώσεις.
2. Στο κεφάλαιο 3 γίνεται εισαγωγή στα βασικά σημεία της θεωρίας της Μηχανικής Μάθησης, με εστίαση στα Νευρωνικά Δίκτυα. Εισάγονται και αναλύονται όλες οι τεχνικές που θα είναι απαραίτητες για την μελέτη των σχετικών μεθόδων.
3. Στο κεφάλαιο 4 μελετώνται όλες οι μέθοδοι της σύγχρονης βιβλιογραφίας που αφορούν την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων με χρήση μηχανικής μάθησης με νευρωνικά δίκτυα. Στο κεφάλαιο εστιάζουμε στην θεωρητική θεμελίωση της σημαντικότερης μεθόδου και παρουσιάζουμε αναλυτικά και διαισθητικά τις αποδείξεις που την αποτελούν.
4. Στο κεφάλαιο 5 παρουσιάζουμε τα δικά μας πειραματικά αποτελέσματα σχετικά με την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων για SEDs . Παρουσιάζουμε αναλυτικά την μέθοδό μας, τις πειραματικές μας επιλογές και τα σημαντικότερα πειραματικά αποτελέσματα που έχουμε ως την ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας.

Κεφάλαιο 2

Αντίστροφα Προβλήματα και Κλασσικές Προσεγγίσεις

2.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα ορίσουμε με περισσότερη ακρίβεια την έννοια του αντίστροφου προβλήματος, θα ορίσουμε με αυστηρό φορμαλισμό ορισμένα από τα προβλήματα αυτά και θα δούμε κλασσικές προσεγγίσεις για την επίλυσή τους.

2.2 Τι ονομάζουμε Αντίστροφο Πρόβλημα;

Η οικογένεια των Αντίστροφων Προβλημάτων δεν είναι αυστηρά ορισμένη, αλλά συνίσταται στα προβλήματα αυτά που διαχειρίζονται ελλιπή ή/και διαβρωμένα δεδομένα για την πρόβλεψη της πλήρους και ανόθευτης πληροφορίας που θεωρείται ότι ενυπάρχει σε αυτά [6]. Με άλλα λόγια, θεωρείται ότι υπάρχει ένα άγνωστο σήμα που περιγράφει κάποια ιδιότητα ή αντικείμενο του κόσμου, από το οποίο λαμβάνουμε ελλειείς ή/και θορυβώδεις μετρήσεις μέσω κάποιας μετρητικής διαδικασίας ή κάποιου συστήματος. Μέσω αυτών των μετρήσεων επιθυμούμε να ανακατασκευάσουμε το άγνωστο σήμα, δηλαδή θέλουμε να γενικεύσουμε την περιορισμένη πληροφορία που μας προσφέρουν οι μετρήσεις σε πλήρη πληροφορία που περιγράφει το άγνωστο σήμα. Προκειμένου να επιλύσουμε ένα τέτοιο πρόβλημα, που αυτόνομα είναι κακώς ορισμένο, είναι απαραίτητο να χρησιμοποιήσουμε υποθέσεις (priors) π.χ. για την δομή ή τη φύση του άγνωστου σήματος. Αυτή η διαδικασία στα μαθηματικά ονομάζεται *regularization*.

2.3 Φορμαλισμός

Το πιο απλό και συγχρόνως μη τετριμμένο αντίστροφο πρόβλημα που αξίζει να εξετάσουμε ονομάζεται *compressed sensing*. Πρόκειται για το πρόβλημα όπου θέλουμε να ανακτήσουμε το άγνωστο διακριτό σήμα $x^* \in \mathbb{R}^n$, από μετρήσεις $y \in \mathbb{R}^m$ που λαμβάνονται με κάποια γραμμική διαδικασία η οποία περιγράφεται από τον πίνακα μετρήσεων $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Το πρόβλημα

αναπαριστάται σαν ένα γραμμικό σύστημα:

$$y = Ax^*. \quad (2.1)$$

ή

$$y_i = \langle a_i, x^* \rangle, \quad i = 1, \dots, m \quad (2.2)$$

, όπου τα $a_i \in \mathbb{R}^n$ είναι γνωστά «μετρητικά» σήματα. Αρχικά, το πρόβλημα φαίνεται απλό καθώς η επίλυσή του αντιστοιχεί στην επίλυση ενός γραμμικού συστήματος. Ωστόσο, το πρόβλημα γίνεται ενδιαφέρον όταν ο αριθμός των μετρήσεων που λαμβάνουμε από το σήμα x^* είναι μικρότερος (σημαντικά) από την διάστασή του, δηλαδή $m \ll n$. Σε αυτή την περίπτωση το γραμμικό σύστημα είναι αόριστο - έχει περισσότερους αγνώστους από εξισώσεις/μετρήσεις και επομένως άπειρες λύσεις. Με άλλα λόγια, το αντίστροφο πρόβλημα είναι κακώς ορισμένο.

Μία πιο ρεαλιστική θεώρηση του compressed sensing είναι αυτή που μας επιτρέπει να συμπεριλάβουμε και κάποιο προσθετικό θόρυβο $\eta \in \mathbb{R}^m$ στις μετρήσεις που λαμβάνουμε. Πράγματι, προκειμένου να μοντελοποιήσουμε πραγματικά προβλήματα είναι απαραίτητο να συμπεριληφθεί κάποια έννοια θορύβου και να αναζητήσουμε τρόπους επίλυσης που δεν εμφανίζουν αστάθεια ως προς αυτόν. Έχουμε, δηλαδή:

$$y = Ax^* + \eta. \quad (2.3)$$

Όπως συμβαίνει γενικά για τα αντίστροφα προβλήματα, το compressed sensing με ή χωρίς θόρυβο είναι κακώς ορισμένο, επομένως για την επίλυσή του πρέπει να χρησιμοποιήσουμε υποθέσεις που αφορούν δομικές ιδιότητες του άγνωστου σήματος x^* . Σε αυτή τη μεθοδολογία θα επικεντρωθούμε στην συνέχεια.

Το compressed sensing είναι, φυσικά, γραμμικό πρόβλημα καθώς λαμβάνουμε μετρήσεις του σήματος μέσω ενός γραμμικού συστήματος. Ως επέκταση, μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι μετρήσεις y λαμβάνονται κατά απόλυτη τιμή. Με άλλα λόγια, διατηρούμε μόνο το πλάτος των μετρήσεων ενώ δεν διατηρούμε την πληροφορία για την φάση. Έχουμε, δηλαδή:

$$y = |Ax^*|, \quad (2.4)$$

όπου θεωρούμε ότι ο τελεστής $|\cdot|$ εφαρμόζεται ανά στοιχείο. Ο τελεστής $|\cdot|$ εισάγει μη-γραμμικότητα στις μετρήσεις και το πρόβλημα γίνεται σημαντικά πιο πολύπλοκο. Το νέο πρόβλημα ονομάζεται compressed phase retrieval και έχει μελετηθεί εκτενώς και παράλληλα με το compressed sensing, καθώς μοντελοποιούν σημαντικά πραγματικά προβλήματα στα οποία θα αναφερθούμε στη συνέχεια.

2.4 Κλασικές Προσεγγίσεις Επίλυσης

Το πρόβλημα του compressed sensing (με θορυβώδεις μετρήσεις) απασχόλησε στις ανεξάρτητες ερευνητικές εργασίες [18] και [14, 15], όπου και θεμελιώθηκε η προσεγγιστική επίλυση με τεχνικές κυρτής βελτιστοποίησης [13]. Σε ερευνητικές εργασίες που ακολούθησαν [1, 4, 7, 38, 41], μελετήθηκαν οι δομικές ιδιότητες και προϋποθέσεις για το άγνωστο σήμα/διάνυσμα προς εκτίμηση και τον πίνακα μετρήσεων, που μας επιτρέπουν την επίλυση του προβλήματος.

2.4.1 Υπόθεση «αραιού» σήματος

Όπως αναφέραμε παραπάνω, θεωρούμε το πρόβλημα του compressed sensing στην περίπτωση που είναι αόριστο, δηλαδή υπάρχουν πολλά διαφορετικά σήματα που συμφωνούν με τις δεδομένες μετρήσεις. Σε αυτή την περίπτωση είναι απαραίτητη μία επιπλέον δομική υπόθεση για την εύρεση του επιθυμητού σήματος x^* . Στις παραπάνω προσεγγίσεις, η βασική δομική υπόθεση που χρησιμοποιείται για το άγνωστο σήμα είναι ότι αναζητούμε μία «αραιή» αναπαράστασή του, δηλαδή ένα σήμα με «μικρό» στήριγμα.

Ορισμός 2.1. Λέμε ότι ένα σήμα $x \in \mathbb{R}^n$ είναι k -sparse ή έχει «μικρό» στήριγμα S , με $|S| = k$ αν το x έχει το πολύ k μη μηδενικά στοιχεία. Επιπλέον, ισχύει $k < n$ (και συχνά $k \ll n$).

Με την υπόθεση ότι το άγνωστο σήμα x^* είναι k -sparse, με k αρκετά μικρό, μπορούμε να ελπίζουμε στην ανάκτησή του, ακόμα και ακριβώς. Θα μπορούσαμε να το πετύχουμε αυτό με επίλυση του ακόλουθου προβλήματος βελτιστοποίησης:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_0 \quad s.t. \quad y = Ax \quad (2.5)$$

, όπου $\|\cdot\|_0$ είναι η l_0 -«νόρμα», που ισούται με το πλήθος των μη μηδενικών στοιχείων του διανύσματος. Ονομάζεται καταχρηστικά νόρμα καθώς δεν έχει όλες τις ιδιότητες μίας νόρμας και συγχρόνως δεν είναι κυρτή συνάρτηση. Κατά συνέπεια, η ελαχιστοποίησή της αποτελεί συνδυαστικό πρόβλημα και δεν μπορεί να γίνει αποδοτικά, μάλιστα είναι NP-hard.

Σε τέτοιες περιπτώσεις, μία συνήθης προσέγγιση είναι η χαλάρωση του προβλήματος, δηλαδή η ελαχιστοποίηση μίας συνάρτησης που προσεγγίζει καλά την αρχική και έχει την χρήσιμη ιδιότητα της κυρτότητας που επιτρέπει αποδοτική βελτιστοποίηση. Σε αυτή την περίπτωση το πρόβλημα μπορεί να αντικατασταθεί από το ακόλουθο γραμμικό πρόγραμμα:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_1 \quad s.t. \quad y = Ax \quad (2.6)$$

Θα αναφερομαστε στο παραπάνω ως Basis Pursuit Linear Program (BPLP).

Θυμόμαστε ότι:

Ορισμός 2.2. Η l_1 -νόρμα ενός διανύσματος x ή $\|x\|_1$ ισούται με το άθροισμα των απολύτων τιμών των στοιχείων του.

Από τον παραπάνω ορισμό δεν προκύπτει άμεσα πότε η επίλυση του προβλήματος 2.6 είναι ισοδύναμη με την επίλυση του αρχικού 2.5. Πράγματι, αν υποθέσουμε ότι το πρόβλημα 2.5 έχει μία μοναδική βέλτιστη λύση x^* θα θέλαμε να εξετάσουμε αν η επίλυση του 2.6 μας οδηγεί στην ίδια λύση x^* , δηλαδή κατά πόσο έχουμε ισοδυναμία των δύο προβλημάτων 2.5 και 2.6. Μία απλή συνθήκη που πρέπει να ισχύει για να μπορούμε να ελπίζουμε σε ισοδυναμία προκύπτει από την ακόλουθη παρατήρηση:

Έστω \hat{x} η μοναδική βέλτιστη λύση του 2.6. Η λύση είναι μοναδική λόγω της κυρτότητας της l_1 -νόρμας. Έστω ότι υπάρχει \tilde{x} , τέτοιο ώστε $\|\tilde{x}\|_0 \leq \|\hat{x}\|_0 = k$, που ικανοποιεί τους γραμμικούς περιορισμούς του BPLP, είναι δηλαδή feasible για το γραμμικό πρόγραμμα. Με

άλλα λόγια, έστω ότι υπάρχει \tilde{x} πιο «αραιό» από την λύση του 2.6 \hat{x} , τέτοιο ώστε $y = A\tilde{x}$. Τότε:

$$A\hat{x} = A\tilde{x} = y \implies A(\hat{x} - \tilde{x}) = 0.$$

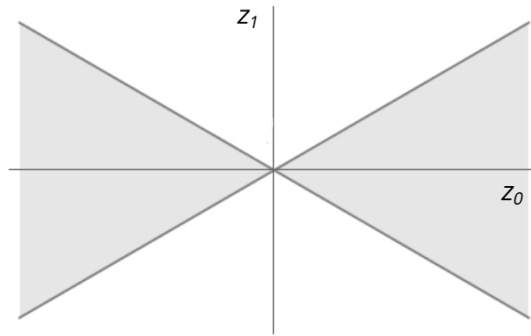
Αυτό σημαίνει ότι το $\hat{x} - \tilde{x}$ ανήκει στον μηδενικό χώρο (nullspace) του A . Όπου, ο μηδενικό χώρος (nullspace) του πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, ορίζεται από το ακόλουθο σύνολο:

$$\text{null}(A) = \{z \in \mathbb{R}^n | Az = 0\}$$

Παρατηρούμε επίσης ότι εφόσον $\|\tilde{x}\|_0 \leq \|\hat{x}\|_0 = k$, το $\hat{x} - \tilde{x}$ θα είναι $2k$ -sparse. Για να ελπίζουμε λοιπόν στην προαναφερθείσα ισοδυναμία χρειάζεται να υποθέσουμε κάτι σαν το ακόλουθο:

$$Az \neq \mathbf{0},$$

για όλα τα «αραιά» σήματα z . Σε αυτό το σημείο χρειάζεται να χαρακτηρίσουμε αυστηρά το σύνολο των σημάτων στα οποία αναφερόμαστε εδώ. Για δεδομένο υποσύνολο $S \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$, έστω το σύνολο $\mathbb{C}(S) := \{z \in \mathbb{R}^n | \|z_{S^c}\|_1 \leq \|z_S\|_1\}$. Διαισθητικά, το σύνολο αυτό είναι ο κώνος που περιέχει όλα τα διανύσματα των οποίων η μεγαλύτερη μάζα, δηλαδή το σύνολο των στοιχείων με τις μεγαλύτερες τιμές (κατ' απόλυτη τιμή), απαριθμείται στο S , συμπεριλαμβανομένων και αυτών που έχουν στήριγμα εξ ολοκλήρου εντός του S .



Σχήμα 2.1: Οπτικοποίηση του κώνου στις δύο διαστάσεις. Σκιαγραφείται η περιοχή $\mathbb{C}(\{0\})$ για $z = [z_0, z_1]^T$

Τώρα μπορούμε να προχωρήσουμε στον αυστηρό ορισμό της ιδιότητας την οποία περιγράφουμε παραπάνω. Αποτυπώνεται αυστηρά στην ιδιότητα του περιορισμένου μηδενικού χώρου (restricted nullspace) για τον πίνακα A , που ουσιαστικά σημαίνει ότι τα «αραιά» διανύσματα είναι «μακριά» από τον μηδενικό χώρο (nullspace) του A .

Ορισμός 2.3. *Restricted Nullspace property.* Για δεδομένο υποσύνολο $S \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$, λέμε ότι ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ικανοποιεί την ιδιότητα του περιορισμένου μηδενικού χώρου στο S , και συμβολίζουμε με $RN(S)$, αν:

$$\text{null}(A) \cap \mathbb{C}(S) = \{\mathbf{0}\}$$

Η παραπάνω ιδιότητα, $RN(S)$, είναι ιδιαίτερα σημαντική διότι αποδεικνύεται ότι είναι ικανή και αναγκαία συνθήκη για την ισοδυναμία των 2.5 και 2.6, στην περίπτωση που η μοναδική λύση του 2.5 x^* έχει «μικρό» στήριγμα S .

Θεώρημα 2.1. Έστω $x^* \in \mathbb{R}^n$ η μοναδική λύση του προβλήματος 2.5, με στήριγμα S . Το πρόβλημα 2.6 (BPLP) έχει μοναδική λύση το x^* αν και μόνο αν ο πίνακας A έχει την ιδιότητα $RN(S)$.

Απόδειξη. (\Rightarrow)

Έστω ότι υπάρχει $z \in \text{null}(A) \cap \mathbb{C}(S)$ με $z \neq \mathbf{0}$, επομένως $\|z_{S^c}\|_1 \leq \|z_S\|_1$. Θεωρούμε ότι $y = Az_S$. Από αυτή την υπόθεση προκύπτει $x^* = z_S$ η μοναδική λύση του 2.5.

Έστω, τώρα ότι το x^* είναι μοναδική λύση και του 2.6. Θα δούμε ότι αυτή η υπόθεση οδηγεί σε άτοπο: Έχουμε,

$$A(x^* + z_{S^c}) = A(z_S + z_{S^c}) = Az = \mathbf{0} \implies Az_{S^c} = Ax^* = y$$

και, από υπόθεση:

$$\|z_{S^c}\|_1 \leq \|z_S\|_1 \implies \|x^*\|_1 \geq \|z_{S^c}\|_1.$$

Άτοπο.

(\Leftarrow)

Έστω ότι ο A έχει την ιδιότητα $RN(S)$ και ότι το x^* δεν είναι η μοναδική λύση του 2.6. Θα υπάρχει $x \neq x^*$ τέτοιο ώστε $\|x\|_1 \leq \|x^*\|_1$ και $Ax = Ax^*$. Έστω $z = x - x^*$. Για το z θα ισχύει:

$$Az = A(x - x^*) = \mathbf{0} \implies z \in \text{null}(A).$$

και $z \neq \mathbf{0}$ αφού $x \neq x^*$. Επιπλέον,

$$\|z_{S^c}\|_1 = \|x_{S^c}\|_1 \quad (x_{S^c}^* = \mathbf{0})$$

$$= \|x_{S^c}\|_1 + \|x_S - x_S + x^*\|_1 - \|x^*\|_1 \leq \|x_{S^c}\|_1 + \|x_S\|_1 + \|x_S - x^*\|_1 - \|x^*\|_1 \quad (\text{triangle inequality})$$

$$= \|x\|_1 + \|z_S\|_1 - \|x^*\|_1 \leq \|z_S\|_1 \quad (x_{S^c}^* = \mathbf{0}, \|x\|_1 \leq \|x^*\|_1)$$

$$\implies \|z_{S^c}\|_1 \leq \|z_S\|_1.$$

Συνεπώς, το z παραβιάζει την ιδιότητα $RN(S)$ του A . Άτοπο. □

Η δομική υπόθεση του k -sparse σήματος που χρησιμοποιούμε πράγματι συμφωνεί με την παραδοχή του θεωρήματος 2.1, εφόσον $|S| \leq k$. Ωστόσο για να ελεγχθούν οι προϋποθέσεις του θεωρήματος χρειάζεται να έχουμε γνώση του συνόλου S . Αυτή είναι παράλογη προϋπόθεση καθώς το στήριγμα του άγνωστου σήματος είναι φυσικά επίσης άγνωστο. Έτσι θα θέλαμε να αντικαταστήσουμε την υπόθεση αυτή με μία πιο ευέλικτη που να βασίζεται στον πληθάρημο του στήριγματος και όχι στα στοιχεία του. Μία τέτοια υπόθεση θα μπορούσε να είναι η «ενιαία» ιδιότητα περιορισμένου μηδενωχώρου (uniform Restricted Nullspace property)

Ορισμός 2.4. Λέμε ότι ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ικανοποιεί την «ενιαία» ιδιότητα περιορισμένου μηδενωχώρου τάξης k , για $0 < k \leq n$, και συμβολίζουμε με k -RN, όταν έχει την ιδιότητα $RN(S)$, για κάθε σύνολο $S \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ με $|S| \leq k$.

Συνδυάζοντας τα παραπάνω προκύπτει ότι αν ο A έχει την ιδιότητα k -RN και το άγνωστο σήμα είναι k -sparse τότε ισχύει η ισοδυναμία του θεωρήματος 2.1 και το πρόβλημα του compressed sensing χωρίς θόρυβο λύνεται αποδοτικά.

Είναι σημαντικό λοιπόν να μπορούμε να ελέγξουμε δεδομένο πίνακα A για της προϋποθέσεις που μας επιτρέπουν αποδοτική επίλυση του compressed sensing . Αυτό το πρόβλημα έχει μελετηθεί εκτενώς και έχουν οριστεί πολλές ιδιότητες πιο γενικές και ευέλικτες απο αυτή του περιορισμένου μηδενοχώρου, π.χ. οι pairwise incoherence ([19, 21, 55]) και Restricted Isometry Property (RIP) ([14]). Πιο πετυχημένη στον υπολογισμό ρεαλιστικών φραγμάτων για την επίλυση του compressed sensing έχει αναδειχθεί η RIP :

Ορισμός 2.5. *Restricted Isometry Property (RIP)* . Λέμε ότι ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ικανοποιεί την ιδιότητα RIP , και συμβολίζουμε με $RIP(k, \delta_k)$, αν:

$$(1 - \delta_k) \|x\|_2^2 \leq \|Ax\|_2^2 \leq (1 + \delta_k) \|x\|_2^2,$$

, για κάθε k -sparse x , όπου $\delta_k \in (0, 1)$ σταθερά (η μικρότερη σταθερά για την οποία ισχύει η συνθήκη).

Η ιδιότητα RIP εξασφαλίζει ότι ο πίνακας A , ως γραμμικός μετασχηματισμός πάνω στο σήμα x , μεταβάλλει λίγο το μήκος του σήματος στο διανυσματικό χώρο, εάν το σήμα είναι $\leq k$ -sparse (έχει δηλαδή το πολύ k μη μηδενικά στοιχεία), εξού και το όνομα «περιορισμένη ισομετρία» (restricted isometry). Με άλλα λόγια, αν ο A έχει την ιδιότητα RIP τότε επιδρά σαν προσεγγιστική ισομετρία σε όλα τα «αραιά» σήματα.

Ας δούμε διαισθητικά γιατί η ιδιότητα αυτή είναι σημαντική στην περίπτωση μας. Έστω ότι έχουμε μετρήσεις $y = Ax$ από ένα αυθαίρετο $k/2$ -sparse σήμα x . Για να μπορούμε να επιλύσουμε το compressed sensing για το αυθαίρετο σήμα θα πρέπει να μπορούμε να διακρίνουμε μεταξύ των μετρήσεων Ax_1 και Ax_2 για δύο οποιαδήποτε $k/2$ -sparse σήματα x_1, x_2 που διαφέρουν σημαντικά. Αυτή η υπόθεση πρέπει να ισχύει ώστε αν $x \equiv x_1$ να μπορούμε να το διακρίνουμε από το x_2 χρησιμοποιώντας τις μετρήσεις $y = Ax_1 \neq Ax_2$. Αντιθέτως, αν έχουμε $y = Ax_1 = Ax_2$ για οποιαδήποτε x_1, x_2 , δεν μπορούμε να ελπίζουμε ότι θα είμαστε ικανοί να επιλύσουμε το compressed sensing για το αυθαίρετο σήμα x . Θέλουμε λοιπόν για δύο οποιαδήποτε $k/2$ -sparse σήματα x_1, x_2 που διαφέρουν σημαντικά, οι μετρήσεις Ax_1 και Ax_2 επίσης να διαφέρουν σημαντικά. Αν υπολογίσουμε την διαφορά $x_1 - x_2$ για δύο οποιαδήποτε $k/2$ -sparse σήματα, αυτή θα είναι $\leq k$ -sparse . Επομένως, η ιδιότητα $RIP(k, \delta_k)$ (όπου όσο πιο μικρό δ_k τόσο πιο ακριβής προσέγγιση ισομετρίας) μας επιτρέπει να ποσοτικοποιήσουμε την διαφορά μεταξύ των μετρήσεων Ax_1 και Ax_2 , ώστε να εξετάσουμε αν μπορούμε να επιλύσουμε το compressed sensing για ένα $k/2$ -sparse σήμα.

Είναι εύκολο να φανταστούμε πώς η ιδιότητα $RIP(k, \delta_k)$ για ένα πίνακα συνεπάγεται την ιδιότητα k -RN , συνεπώς μας οδηγεί ξανα στην ισοδυναμία του θεωρήματος 2.1 και στην αποδοτική επίλυση του compressed sensing . Πιο αυστηρά αποδεικνύεται το παρακάτω θεώρημα [46]:

Θεώρημα 2.2. *Αν ο πίνακας μετρήσεων του compressed sensing έχει την ιδιότητα $RIP(2k, \delta)$ με $\delta < 1/3$, τότε*

1. Έχει, επιπλέον, την ιδιότητα k -RN .
2. Μπορούμε να επιλύσουμε το *compressed sensing* μέσω του 2.6 για κάθε k -sparse σήμα x^* .

Η ιδιότητα RIP αποδεικνύεται για διάφορους τυχαίους πίνακες που μοντελοποιούν συγκεκριμένα προβλήματα *compressed sensing* με την βοήθεια τεχνικών από την θεωρία τυχαίων πινάκων καθώς και γνωστών *concentration bounds* ([51], [17]). Μία σημαντική περίπτωση που θα μας απασχολήσει και στη συνέχεια είναι ο γκαουσιανός τυχαίος πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, με *i.i.d* (independent identically distributed) στοιχεία $A_{ij} \sim \mathcal{N}(0, \frac{1}{m})$. Πιο αναλυτικά, για αυτή την περίπτωση πίνακα μετρήσεων αποδεικνύεται *tight* κάτω φράγμα για το πλήθος των μετρήσεων $m \geq \Theta(k \log \frac{en}{k})$. Για πλήθος μετρήσεων $m \geq ck \log \frac{en}{k}$ με c αρκούντως μεγάλο, ισχύει η ιδιότητα RIP (k, δ) , με μεγάλη πιθανότητα. Παρατηρούμε εδώ, ότι το φράγμα σχετίζεται με το πόσο *sparse* είναι τα σήματα στα οποία αναφέρεται η ιδιότητα, δηλαδή γραμμικά με την τάξη k και λογαριθμικά με τον λόγο $\frac{n}{k}$ με τον οποίο συσχετίζεται η τάξη k με την διάσταση n των σημάτων. Ωστόσο, το φράγμα δεν σχετίζεται με την σταθερά δ .

Μέχρι εδώ, έχουμε κατακτήσει γνώση σχετικά με το πότε η απλή θεώρηση του *compressed sensing* επιλύεται αποδοτικά με την μέθοδο της χαλάρωσης ενώ έχουμε εισάγει σημαντικές ιδιότητες για τον πίνακα μετρήσεων. Ωστόσο, έχουμε αποφύγει ως τώρα την θεώρηση θορύβου στις μετρήσεις, που είναι η πιο ρεαλιστική και ενδιαφέρουσα περίπτωση του *compressed sensing*. Με αυτήν την περίπτωση θα ασχοληθούμε στην συνέχεια προσπαθώντας να προσαρμόσουμε την παραπάνω μελέτη, αφού πρώτα επαναπροσδιορίσουμε τα ερωτήματά μας.

2.4.2 Η θορυβώδης περίπτωση

Επεκτείνουμε, λοιπόν, το πρόβλημα του *compressed sensing* με τέλειες μετρήσεις στην πιο ρεαλιστική εκδοχή του που περιέχει προσθετικό θόρυβο (πρόβλημα 2.3).

Κατ' αναλογία με το BPLP, ορίζουμε τα ακόλουθα προβλήματα που ακολουθούν την λογική της l_1 -ελαχιστοποίησης.

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|x\|_1 \quad s.t. \quad \frac{1}{2m} \|y - Ax\|_2^2 \leq b^2 \quad (\text{Relaxed Basis Pursuit (rBP)}) \quad (2.7)$$

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{2m} \|y - Ax\|_2^2 \right\} \quad s.t. \quad \|x\|_1 \leq R \quad (\text{LASSO}) \quad (2.8)$$

Παρατηρούμε ότι, στο rBP δεν προσπαθούμε πλέον να επιλύσουμε το γραμμικό σύστημα 2.1, διότι τα δεδομένα μας παρουσία του θορύβου η δεν αντιστοιχούν τέλεια στις μετρήσεις y . Αντιθέτως, «χαλαρώνουμε» τον περιορισμό του BPLP (εξού και rBP). Σε αυτή την περίπτωση, η παράμετρος b αποτελεί μία εκτίμηση του μεγέθους του θορύβου, ενώ για $b = 0$ παίρνουμε το BPLP.

Επιπλέον, τα δύο παραπάνω προβλήματα έχουν την ίδια λύση για κατάλληλη επιλογή των παραμέτρων b, R .

Στην θορυβώδη περίπτωση δεν είναι ρεαλιστικό να περιμένουμε ότι θα ανακτήσουμε το πραγματικό σήμα x^* . Ωστόσο, θα υποθέσουμε ότι υπάρχει το άγνωστο σήμα x^* και θα κάνουμε μία προσέγγιση \hat{x} που θα πλησιάζει σε αυτό. Θα πάρουμε την προσέγγιση \hat{x} επιλύοντας το πρόβλημα βελτιστοποίησης LASSO (2.8, [47]), όπου ο σκοπός είναι να λάβουμε την εκτίμηση που συμφωνεί κατά το δυνατόν με τις μετρήσεις κανονικοποιώντας με τον δομικό περιορισμό του «αραιού» σήματος. Θα μας απασχολήσουν επομένως τα ακόλουθα ρεαλιστικά ερωτήματα:

1. Υπό ποιές προϋποθέσεις μπορούμε να φράξουμε το σφάλμα ανάκτησης $\|x^* - \hat{x}\|_2$;
2. Υπό τις προϋποθέσεις αυτές, πόσο μικρό σφάλμα μπορούμε να πετύχουμε ;

Μας αφορούν ιδιαίτερα προϋποθέσεις που σχετίζονται με το πλήθος και το είδος των μετρήσεων που λαμβάνουμε, δηλαδή την παράμετρο m και τις ιδιότητες του πίνακα A . Με αυτόν τον τρόπο θα επεκτείνουμε την μελέτη του προηγούμενου υποκεφαλαίου στην θορυβώδη περίπτωση. Πράγματι, ιδανικά θα θέλαμε να πετύχουμε ελάχιστο σφάλμα με μικρό αριθμό μετρήσεων και με τους λιγότερους δυνατούς περιορισμούς, κατ' αναλογία με προηγούμενως που είδαμε την ισοδυναμία του προβλήματος 2.5 με την «χαλαρωμένη» εκδοχή του 2.6 για κατάλληλους πίνακες μετρήσεων και με μικρό αριθμό μετρήσεων.

Συνθήκες για επιτυχή ανάκτηση

Στην πραγματικότητα το ερωτήματα (1) που τέθηκε παραπάνω σχετίζεται με ιδιότητες της συνάρτησης $\mathcal{L}_m(x) = \frac{1}{2m} \|y - Ax\|_2^2$ που προσπαθούμε να ελαχιστοποιήσουμε, την οποία θα ονομάζουμε στο εξής συνάρτηση κόστους ή κόστος. Κατά την επίλυση του LASSO ελαχιστοποιούμε την τιμή της συνάρτησης κόστους, υπό τον περιορισμό της l_1 -νόρμας του άγνωστου σήματος. Φυσικά, η \mathcal{L}_m είναι κυρτή συνάρτηση, ως τετράγωνο νόρμας. Όμως, η κυρτότητα δεν μας εξασφαλίζει την ικανότητα να ανακτήσουμε ένα σήμα \hat{x} που να πλησιάζει το επιθυμητό x^* , καθώς κατά την ελαχιστοποίηση πρέπει ταυτόχρονα να ικανοποιείται ο δομικός περιορισμός (φράγμα της l_1 -νόρμας) και να εκτιμάται ένα επίπεδο θορύβου η (που σχετίζεται με την τιμή του κόστους που επιτυγχάνεται). Είναι φανερό, ότι το πρόβλημα δεν μπορεί να λυθεί ακριβώς λόγω της εισαγωγής άγνωστου θορύβου στο μοντέλο.

Διαισθητικά, θέλουμε η συνάρτηση κόστους να είναι τέτοια ώστε αν η διαφορά $\Delta \mathcal{L}_m = |\mathcal{L}_m(x^*) - \mathcal{L}_m(\hat{x})|$ τείνει στο 0 όσο το πλήθος των μετρήσεων m αυξάνεται, τότε το σφάλμα ανάκτησης $\|x^* - \hat{x}\|_2$ να τείνει επίσης στο 0. Η διαίσθηση αυτή αναπτύσσεται καλύτερα αν παρατηρήσουμε την εικόνα 2.2, που παρουσιάζει την αναλογία για σήματα μίας διάστασης.

Έστω ότι αυτή είναι η μορφή της συνάρτησης κόστους κοντά στην εκτίμηση \hat{x} . Στην εικόνα στα αριστερά, παρατηρούμε «απότομη» κυρτότητα γύρω από την εκτίμηση \hat{x} , που μας εξασφαλίζει ότι αν πετύχουμε μικρή διαφορά $\Delta \mathcal{L}$ μπορούμε να ελπίζουμε ότι η εκτίμηση \hat{x} είναι κοντά στο άγνωστο σήμα x^* . Αντίθετα, στην εικόνα στα δεξιά όπου παρατηρούμε επίπεδη μορφή γύρω από την εκτίμηση \hat{x} , η μικρή διαφορά $\Delta \mathcal{L}$ δεν μας εγγυάται επιτυχή ανάκτηση του άγνωστου σήματος x^* .

Επομένως, επιθυμούμε να μοντελοποιήσουμε μαθηματικά και σε πολλές διαστάσεις την ιδιότητα της συνάρτησης της αριστερής εικόνας, η οποία είναι η επιθυμητή κατάσταση για να

μπορούμε να εγγυηθούμε επιτυχή ανάκτηση του άγνωστου σήματος, με αντίστοιχα φράγματα του σφάλματος ανάκτησης. Η ιδιότητα αυτή ονομάζεται *ισχυρή κυρτότητα* και είναι μία πολύ σημαντική έννοια για την θεωρία κυρτής βελτιστοποίησης, καθώς χρησιμοποιείται για να παραχθούν εγγυήσεις σύγκλισης σε γραμμικό χρόνο για σημαντικούς αλγορίθμους βελτιστοποίησης που βασίζονται σε gradient descent (στους οποίους θα αναφερθούμε συνοπτικά σε επόμενο κεφάλαιο). Η ισχυρή κυρτότητα [13] ορίζεται ως εξής:

Ορισμός 2.6. Λέμε ότι μία παραγωγίσιμη συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι ισχυρά κυρτή στο $x \in \mathbb{R}^n$ αν:

$$f(y) \geq f(x) + \nabla f(x)^T(y - x) + \frac{\gamma}{2} \|y - x\|_2^2$$

, για κάποια παράμετρο $\gamma > 0$ και για κάθε $y \in \mathbb{R}^n$.

Η έννοια γενικεύει αυτή της κυρτότητας, καθώς ευτελίζεται σε αυτήν για $\gamma = 0$. Επιπλέον, αν η συνάρτηση $f(\cdot)$ είναι δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη, η έννοια μπορεί να οριστεί μέσω του Hessian πίνακα $\nabla^2 f(x)$, που είναι ανάλογο της δεύτερης παραγώγου για συναρτήσεις στις πολλές διαστάσεις. Σε αυτή την περίπτωση, ο ισοδύναμος ορισμός ισχυρής κυρτότητας στο $x \in \mathbb{R}^n$ προϋποθέτει κάτω φράγμα $\gamma > 0$ για την ελάχιστη ιδιοτιμή του $\nabla^2 f(y)$, για κάθε y στη γειτονιά του x . Δηλαδή, για ένα σύνολο N , που μπορεί να αποτελεί «γειτονιά» γύρω από το σημείο ενδιαφέροντος x , η f είναι ισχυρά κυρτή στο N_x αν και μόνο αν:

$$\nabla^2 f(y) \succeq \gamma I \quad \forall y \in N$$

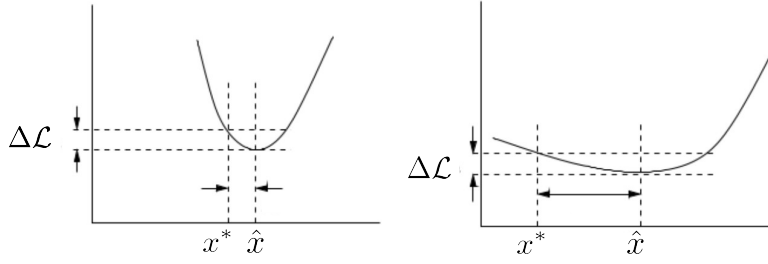
, για κάποια παράμετρο $\gamma > 0$. Ο συμβολισμός \succeq προκύπτει από τον ορισμό της ιδιότητας PSD (positive semi-definiteness) για συμμετρικούς πίνακες:

Ορισμός 2.7. Λέμε ότι ένας συμμετρικός πίνακας $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ είναι PSD (positive semi-definite) αν:

$$x^T H x \geq 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$$

Με άλλα λόγια η ιδιότητα αυτή είναι ανάλογη του προσήμου για συμμετρικούς πίνακες. Επιπλέον, η ιδιότητα PSD για ένα συμμετρικό πραγματικό πίνακα $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ισχύει αν όλες οι ιδιοτιμές του είναι μεγαλύτερες ή ίσες με το μηδέν. Στην περίπτωση μας, χρησιμοποιούμε όμοιο συμβολισμό αλλά αναφερόμαστε σε τιμές φραγμένες μακριά από το μηδέν.

Πράγματι, όπως αναφέρθηκε παραπάνω η συνάρτηση κόστους \mathcal{L}_m που μας απασχολεί είναι πάντοτε κυρτή. Θέλουμε να ελέγξουμε αν είναι και ισχυρά κυρτή. Χρησιμοποιώντας τον δεύτερο ορισμό και με εφαρμογή κανόνων Γραμμικής Άλγεβρας βλέπουμε ότι $\nabla^2 \mathcal{L}_m(x) = \frac{1}{2m} \cdot 2A^T A = A^T A/m$, για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$. Επομένως αρκεί να εξετάσουμε την συμπεριφορά των ιδιοτιμών του πίνακα $A^T A$. Από βασικό συλλογισμό γραμμικής άλγεβρας προκύπτει ότι για πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με $m < n$ ο πίνακας $A^T A$ θα ικανοποιεί $\text{rank}(A^T A) \leq \min(m, n) < n$ και επομένως θα έχει ιδιοτιμή ίση με το 0 ([45]). Θα μπορούσε κανείς να σκεφτεί ότι ο στόχος της επιτυχούς ανάκτησης μέσω της επίλυσης του LASSO είναι αδύνατος. Ωστόσο, ένας περιορισμός όπως η ισχυρή κυρτότητα είναι πιο ισχυρός από αυτόν που μας είναι απαραίτητος. Αντιθέτως, διαπισθητικά καταλαβαίνουμε ότι αρκεί να έχουμε ισχυρή κυρτότητα σε ορισμένες



Σχήμα 2.2: Οπτικοποίηση της ιδιότητας της ισχυρής κυρτότητας. Η αρχική εικόνα προέρχεται από το [41].

κατευθύνσεις του χώρου, και πιο συγκεκριμένα μόνο στην κατεύθυνση που ορίζεται από την διαφορά μεταξύ της εκτίμησης \hat{x} και του άγνωστου σήματος x^* , έστω $\hat{z} = x^* - \hat{x}$. Για να εκφραστεί η παραπάνω κατάσταση, όπου η ισχυρή κυρτότητα «χαλαρώνεται» ως περιορισμός και αφορά μόνο ορισμένες κατευθύνσεις ενδιαφέροντος (π.χ. προς τις οποίες κινείται μία διαδικασία βελτιστοποίησης) έχει οριστεί η έννοια της *περιορισμένης ισχυρής κυρτότητας* ([1, 31, 41, 58]). Υιοθετώντας τον ορισμό [46] που οδηγεί, με φυσικό τρόπο, στην βασική ιδιότητα που θα μας απασχολήσει στη συνέχεια ορίζουμε:

Ορισμός 2.8. *Restricted Strong Convexity (RSC)*. Λέμε ότι μία δύο φορές συνεχώς παραγωγίσιμη συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ είναι περιορισμένα ισχυρά κυρτή στο $x \in \mathbb{R}^n$ υπό το σύνολο \mathbb{C} , αν:

$$\frac{z^T \nabla^2 f(y) z}{\|z\|_2^2} \geq \gamma \quad \forall z \in \mathbb{C} \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

, για κάθε $y \in N$, όπου N η γειτονιά του x , για κάποια παράμετρο $\gamma > 0$.

Ο ορισμός είναι περιορισμένος, καθώς δεν αφορά συναρτήσεις για τις οποίες δεν ορίζεται ο Hessian πίνακας. Επιπλέον, δεν ορίζεται σαφώς η γειτονιά N . Ωστόσο, είναι σαφής η διαίσθηση από την οποία προέκυψε, όπου το σύνολο \mathbb{C} συγκεντρώνει τις κατευθύνσεις ενδιαφέροντος.

Όμως, ποιές είναι αυτές για εμάς; Θυμίζουμε, ότι στην επίλυση του LASSO ισχύει ο γραμμικός περιορισμός της l_1 -νόρμας ενώ το άγνωστο σήμα x^* είναι από υπόθεση k -sparse. Έστω, λοιπόν ότι το στήριγμα του x^* είναι το $S \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ με $|S| = k$. Έστω ότι επιλύουμε το LASSO με $R = \|x^*\|_1$. Τότε, εφόσον το \hat{x} είναι feasible για το πρόγραμμα:

$$\begin{aligned} R = \|x^*\|_1 &= \|x_S^*\|_1 \geq \|x^* - \hat{z}\|_1 \quad (\hat{z} = x^* - \hat{x}) \\ &= \|x_S^* - \hat{z}_S\|_1 + \|\hat{z}_{S^c}\|_1 \geq \|x_S^*\|_1 - \|\hat{z}_S\|_1 + \|\hat{z}_{S^c}\|_1. \\ &\implies \|\hat{z}_{S^c}\|_1 \leq \|\hat{z}_S\|_1. \end{aligned}$$

Επομένως, για κάθε \hat{z} που μας αφορά θα ισχύει $\hat{z} \in \mathbb{C}$, όπου

$$\mathbb{C}(S) := \{z \in \mathbb{R}^n \mid \|z_{S^c}\|_1 \leq \|z_S\|_1\}$$

Γενικεύοντας την ιδιότητα αυτή θα ορίσουμε την οικογένεια συνόλων:

$$\mathbb{C}(S, \alpha) := \{z \in \mathbb{R}^n \mid \|z_{S^c}\|_1 \leq \alpha \|z_S\|_1\}$$

και για συγκεκριμένο βαθμό sparsity $k > 0$

$$\mathbb{C}(k) := \bigcap_{|S|=k} \mathbb{C}(S)$$

Σε αυτό το σημείο, μπορούμε να ορίσουμε την βασική ιδιότητα που εγγυάται την επιτυχή ανάκτηση με επίλυση του LASSO, η οποία θα μας απασχολήσει και στην συνέχεια. Η ιδιότητα ονομάζεται περιορισμένη συνθήκη ιδιοτιμών, Restricted Eigenvalue Condition (REC), που σαφώς προκύπτει από τον χαρακτηρισμό της κυρτότητας της συνάρτησης κόστους μέσω του περιορισμού των ιδιοτιμών του αντίστοιχου Hessian πίνακα. Η ιδιότητα προκύπτει ευθέως από την εφαρμογή της περιορισμένης ισχυρής κυρτότητας (όπως ορίστηκε παραπάνω) για την συνάρτηση κόστους του LASSO.

Ορισμός 2.9. *Restricted Eigenvalue Condition (REC).* Λέμε ότι ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ικανοποιεί την ιδιότητα REC βαθμού $k > 0$ για κάποια παράμετρο $\gamma > 0$, και συμβολίζουμε με $REC(k, \gamma)$, αν:

$$\frac{\frac{1}{m} z^T A^T A z}{\|z\|_2^2} \geq \gamma \quad \forall z \in \mathbb{C}(k) \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

Με απλό συλλογισμό γραμμικής άλγεβρας βλέπουμε ότι η ιδιότητα ισοδυναμεί με:

$$\frac{1}{m} \|Az\|_2^2 \geq \gamma \cdot \|z\|_2^2 \quad \forall z \in \mathbb{C}(k) \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

Με αυτή την ισοδύναμη αναπαράσταση αναδεικνύεται μία ακόμα διαισθητική προέλευση της περιορισμένης συνθήκης ιδιοτιμών, που αφορά την διατήρηση της νόρμας των z από τον γραμμικό μετασχηματισμό - προβολή που ορίζει ο πίνακας A . Η διατήρηση της νόρμας υπό προϋποθέσεις, ή με άλλα λόγια η διατήρηση της πληροφορίας του μήκους του σήματος μέσω της γραμμικής διαδικασίας λήψης μετρήσεων, μας θυμίζει την ιδιότητα της περιορισμένης ισομετρίας που ορίσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο.

Πράγματι, η REC έχει στενή σχέση με τις ιδιότητες RIP και RN καθώς από απλή παρατήρηση προκύπτουν τα ακόλουθα:

Αν ένας πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ έχει την ιδιότητα RIP (k, δ_k) , τότε θα ισχύει η συνθήκη $\frac{\frac{1}{m} z^T A^T A z}{\|z\|_2^2} \geq \gamma$ με $\gamma = \frac{1 - \delta_k}{m}$ για κάθε k -sparse z . Ωστόσο, πρέπει να παρατηρήσουμε εδώ ότι το σύνολο $\mathbb{C}(k)$, όπως ορίστηκε παραπάνω, είναι υπερσύνολο του συνόλου των k -sparse διανυσμάτων του \mathbb{R}^n , και περιέχει επιπλέον τα σχεδόν k -sparse διανύσματα των οποίων η μεγαλύτερη μάζα απαριθμείται σε ένα σύνολο μεγέθους το πολύ k .

Συγχρόνως, η REC (k, γ) άμεσα μας δίνει την k -RN. Πιο συγκεκριμένα, για κάθε $z \in \mathbb{C}(k)$ έχουμε: $\frac{\frac{1}{m} \|Az\|_2^2}{\|z\|_2^2} \geq \gamma \implies \|Az\|_2 \geq \gamma' \|z\|_2$, δηλαδή η νόρμα του Az φράσσεται μακριά από το μηδέν που συνεπάγεται ότι $Az \neq \mathbf{0}$, δηλαδή $z \notin \text{null}(A)$.

Για να ολοκληρώσουμε την ανάλυση αυτού του υποκεφαλαίου, θα δούμε με ποιό τρόπο μπορούμε να εγγυηθούμε την επιτυχή ανάκτηση του άγνωστου σήματος του compressed sensing με επίλυση του LASSO, δεδομένης της ιδιότητας REC για τον πίνακα μετρήσεων. Αποδεικνύεται το ακόλουθο φράγμα:

Θεώρημα 2.3. Έστω ότι ο πίνακας μετρήσεων $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ του compressed sensing ικανοποιεί την ιδιότητα REC (k, γ) . Τότε, για κάθε εκτίμηση \hat{x} που παίρνουμε από την επίλυση του LASSO με $R = \|x^*\|_1$, ισχύει:

$$\|x^* - \hat{x}\|_2 \leq \sqrt{\frac{4}{\gamma m}} \|\eta\|_2$$

Απόδειξη. Η απόδειξη είναι ευθεία και στηρίζεται εξ ολοκλήρου στην ιδιότητα REC και την απλή παρατήρηση ότι εφόσον το \hat{x} είναι η βέλτιστη εκτίμηση του LASSO ενώ το x^* είναι feasible για το πρόγραμμα θα ισχύει: $\|y - A\hat{x}\|_2^2 \leq \|y - Ax^*\|_2^2 \iff \|y - A\hat{x}\|_2 \leq \|y - Ax^*\|_2$.

Έστω το $\hat{z} = x^* - \hat{x}$. Παραπάνω, έχουμε δείξει ότι για $R = \|x^*\|_1$ ισχύει $\|\hat{z}_{S^c}\|_1 \leq \|\hat{z}_S\|_1 \implies \hat{z} \in \mathcal{C}(k)$, επομένως για το \hat{z} θα πρέπει ικανοποιείται η συνθήκη της REC (k, γ) :

$$\frac{1}{m} \|A\hat{z}\|_2^2 \geq \gamma \cdot \|\hat{z}\|_2^2 \implies \|\hat{z}\|_2 \leq \sqrt{\frac{1}{\gamma m}} \|A\hat{z}\|_2. \quad (2.9)$$

Συνεπώς:

$$\begin{aligned} \|x^* - \hat{x}\|_2 &= \|\hat{z}\|_2 \leq \sqrt{\frac{1}{\gamma m}} \|A\hat{z}\|_2 \quad (2.9) \\ &\leq \sqrt{\frac{1}{\gamma m}} \|A(x^* - \hat{x})\|_2 = \sqrt{\frac{1}{\gamma m}} \|(Ax^* - y) + (y - A\hat{x})\|_2 \\ &\leq \sqrt{\frac{1}{\gamma m}} (\|y - Ax^*\|_2 + \|y - A\hat{x}\|_2) \quad (\text{triangle inequality}) \\ &\leq \sqrt{\frac{1}{\gamma m}} 2 \cdot \|y - Ax^*\|_2 \quad (x^* \text{ feasible}) \\ &= \sqrt{\frac{4}{\gamma m}} \|\eta\|_2. \end{aligned}$$

□

2.5 Αντίστροφα Προβλήματα σε Πραγματικά Σήματα

Ένα καλό ερώτημα που μπορεί να διατυπώσει κανείς ως εδώ είναι το εξής: για ποιές οικογένειες σημάτων και για ποιό λόγο είναι η υπόθεση του «αραιού» (k -sparse) σήματος ρεαλιστική;

Πράγματι, το compressed sensing μοντελοποιεί πολλά πραγματικά προβλήματα καθώς εκφράζει την φυσική διαδικασία ανάκτησης ενός άγνωστου σήματος από λίγες, και συνήθως θορυβώδεις, γραμμικές μετρήσεις. Μερικά παραδείγματα για διάφορους τύπους δεδομένων/σημάτων είναι τα ακόλουθα: [16, 20, 27, 39] Ορισμένοι τύποι δεδομένων ικανοποιούν εκ φύσεως την υπόθεση του «αραιού» σήματος ενώ άλλοι μπορεί να μην την ικανοποιούν. Γί αυτό τον

λόγο υπάρχουν επεκτάσεις και γενικεύσεις των ιδιοτήτων που μας υπόσχονται την ικανότητα επιτυχούς ανάκτησης (RIP , REC) και σε διαφορετικές ή επιπρόσθετες δομικές υποθέσεις [5, 22, 28], κατεύθυνση που ξεφεύγει από το πεδίο της παρούσας εργασίας. Ωστόσο, υπάρχει ένας σημαντικός λόγος για τον οποίο εστιάζουμε στη δομική υπόθεση του «αραιού» σήματος. Η υπόθεση αυτή έχει χρησιμοποιηθεί εκτενώς διότι σχετίζεται με μία σημαντική ιδιότητα που έχουν πολλές οικογένειες φυσικών σημάτων, συμπεριλαμβανομένων και των φυσικών εικόνων : την «αραιή» αναπαράσταση σε μία κατάλληλα επιλεγμένη βάση (συχνά διαφορετική από την κανονική βάση του χώρου στον οποίο τα θεωρούμε).

2.5.1 Ορθοκανονικές Βάσεις και Αραιές Αναπαραστάσεις

Έστω το σήμα $z \in \mathbb{R}^n$. Ας φανταστούμε ότι πρόκειται για ένα πραγματικό σήμα, π.χ. ένα ηχητικό σήμα ή μία εικόνα . Στην περίπτωση της εικόνας ας σκεφτούμε ότι την έχουμε ισοπεδώσει σε μονοδιάστατο διάνυσμα όπου κάθε στοιχείο είναι η τιμή ενός pixel . Έστω τώρα μία ορθοκανονική βάση $\{\psi_i\}_{i=0}^n$, ή σε μορφή πίνακα $\Psi = [\psi_1 \cdots \psi_n]$, όπου λόγω ορθοκανονικότητας ισχύει $\psi_i^T \psi_j = 0, \forall i \neq j, \|\psi_i\|_2 = 1, \forall i$ και συνεπώς $\Psi^T \Psi = \mathbb{I}_{n \times n}$.

Η αναπαράσταση του σήματος z στην βάση Ψ , προκύπτει προβάλλοντας το z σε κάθε ένα από τα διανύσματα της βάσης και λαμβάνοντας τους αντίστοιχους συντελεστές α , δηλαδή μέσω ενός διακριτού μετασχηματισμού:

$$z = \sum_{i=0}^n \alpha_i \psi_i = \Psi \alpha.$$

, όπου οι συντελεστές προκύπτουν από την προβολή $\alpha_i = z^T \psi_i$ και $\alpha = \Psi^T z = [\alpha_1 \cdots \alpha_n]^T$.

Φαίνεται, λοιπόν, ότι με κατάλληλη επιλογή των διανυσμάτων της βάσης η νέα αναπαράσταση του σήματος z μέσω των συντελεστών α μπορεί να είναι «αραιά», με την έννοια ότι οι περισσότεροι από τους συντελεστές α_i είναι μηδενικοί ή σχεδόν μηδενικοί. Υπάρχουν αρκετά παραδείγματα τέτοιων διακριτών μετασχηματισμών που έχουν μελετηθεί εκτενώς στη βιβλιογραφία π.χ. Discrete Cosine Transform (DCT) [43], μετασχηματισμός με κυματίδια (Wavelet Transform) [2] ή ο μετασχηματισμός Fourier [33]. Ένα γνωστό σε πολλούς παράδειγμα είναι ο μετασχηματισμός Fourier που είναι διάσημος για την ικανότητά του να αναπαριστά περιοδικά σήματα με ελάχιστη πληροφορία.

2.5.2 Συμπίεση Σημάτων

Σε αυτό το σημείο, θα αναρωτηθούμε πώς μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την ιδιότητα που περιγράψαμε στην προηγούμενη παράγραφο. Ένας απλός τρόπος είναι η συνοπτική αναπαράσταση σημάτων ακριβώς ή κατά προσέγγιση, ή αλλιώς συμπίεση.

Με άλλα λόγια, αν υποθέσουμε ότι ένα πραγματικό σήμα $z \in \mathbb{R}^n$ έχει μία «αραιή» αναπαράσταση υπό κάποια ορθοκανονική βάση, η οποία συνίσταται στους συντελεστές $\{\alpha_i\}_{i=0}^n$, τότε μπορούμε να διατηρήσουμε τους κυρίαρχους συντελεστές (κατ' απόλυτη τιμή) και να μηδενίσουμε τους υπόλοιπους λαμβάνοντας ένα νέο σήμα \hat{a} που προφανώς μπορεί να αποτελεί καλή προσέγγιση του z . Η ποιότητα της προσέγγισης εξαρτάται από το πόσο αραιό είναι

το αρχικό σήμα και από το μέγεθος της αναπαράστασης της προσέγγισης, έστω k , που θα επιλέξουμε. Πιο συγκεκριμένα, μπορούμε να επιλέξουμε ένα $k \ll n$ και να στοχεύσουμε στο να βρούμε μία k -sparse αναπαράσταση του z υπό μία ορθοκανονική βάση Ψ . Αυτό μπορούμε να το πετύχουμε με την επίλυση του ακόλουθου προβλήματος:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^n} \{ \|z - \Psi\alpha\|_2^2 \} \quad s.t. \quad \|\alpha\|_0 \leq k \quad (2.10)$$

, που μας δίνει μία συνοπτική αναπαράσταση $\hat{\alpha}$ η οποία με τη σειρά της δίνει μία καλή προσέγγιση του αρχικού σήματος:

$$\hat{z} = \sum_{i=0}^n \hat{\alpha}_i \psi_i = \Psi \hat{\alpha}.$$

Όπως έχουμε συζητήσει παραπάνω, η επίλυση του προβλήματος με τον περιορισμό $\|\cdot\|_0$ δεν είναι εκ πρώτης όψης αποδοτική. Ωστόσο, λόγω της δομής της αναπαράστασης υπό μία ορθοκανονική βάση, μπορούμε να ακολουθήσουμε την εξής διαδικασία:

1. Να υπολογίσουμε της αναπαράσταση του αρχικού σήματος z υπό την ορθοκανονική βάση Ψ ως $\alpha = \Psi^T z = [\alpha_1 \cdots \alpha_n]^T$.
2. Να ταξινομήσουμε τους συντελεστές $\{\alpha_i\}_{i=0}^n$ κατά απόλυτη τιμή.
3. Να παρουμε μία νέα αναπαράσταση $\hat{\alpha}$ διατηρώντας μόνο τους $k \ll n$ μεγαλύτερους κατά απόλυτη τιμή συντελεστές και μηδενίζοντας τους υπόλοιπους.

Τέτοιου είδους τεχνικές χρησιμοποιούνται σε πρότυπα συμπίεσης πραγματικών σημάτων, π.χ. εικόνων. Ένα σημαντικό παράδειγμα είναι η ψηφιακή κωδικοποίηση εικόνων jpeg-2000 που χρησιμοποιεί τη μέθοδο wavelet thresholding [57].

Η προβολή ενός σήματος σε μία κατάλληλη ορθοκανονική βάση μπορεί να είναι πράγματι χρήσιμη για επιτυχή συμπίεση. Ωστόσο, σημαντική προϋπόθεση είναι η κατασκευή μίας κατάλληλης ορθοκανονικής βάσης που μας δίνει την καλή ιδιότητα της «αραιής» αναπαράστασης και μας επιτρέπει μία καλή εκτίμηση του αρχικού σήματος. Συγχρόνως, η υπολογιστική πολυπλοκότητα υπολογισμού την συνοπτικής αναπαράστασης δεν είναι αμελητέα καθώς προϋποθέτει τον υπολογισμό όλων των συντελεστών προτού επιλέξουμε εκείνους που επικρατούν. Προσεγγίζοντας το πρόβλημα με άλλο τρόπο, μπορούμε να προσπαθήσουμε να πετύχουμε καλή συμπίεση με τυχαίες, αντί για προσεκτικά σχεδιασμένες, προβολές.

Αρχικά ας ορίσουμε μία τυχαία προβολή [10], ως την συνάρτηση $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$, η οποία υπολογίζεται για ένα $x = [x_1, \cdots, x_m]^T \in \mathbb{R}^n$ ως εξής:

$$f(x) = [x_1 \cdot u_1, \cdots, x_m \cdot u_m]^T$$

, όπου $u_1, \cdots, u_m \in \mathbb{R}^n$ τυχαία διανύσματα από κανονική κατανομή με μοναδιαία διακύμανση σε κάθε συνιστώσα. Θα βασίσουμε το επιχειρήμα μας στην ιδιότητα που περιγράφεται απο το παρακάτω θεώρημα. Η ιδιότητα αφορά την διατήρηση της ευκλείδειας νόρμας, ή του μήκους του διανύσματος, πριν και μετά την προβολή. Από βασικές ιδιότητες συγκέντρωσης για την κανονική κατανομή παίρνουμε ότι με μεγάλη πιθανότητα, μία τυχαία προβολή όπως περιγράφεται παραπάνω, διατηρεί το μήκος του διανύσματος που μετασχηματίζει:

Θεώρημα 2.4. *Θεώρημα Τυχαίων Προβολών [10]. Έστω $x \in \mathbb{R}^n$ ένα δεδομένο διάνυσμα και $f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$ μία τυχαία συνάρτηση προβολής, όπως ορίστηκε παραπάνω. Υπάρχει σταθερά $c > 0$ τέτοια ώστε για $\epsilon \in (0, 1)$,*

$$\mathbb{P} [\|f(x)\|_2 \leq \sqrt{m}(1 - \epsilon)\|x\|_2 \text{ or } \|f(x)\|_2 \geq \sqrt{m}(1 + \epsilon)\|x\|_2] \leq 3 \exp(-c\epsilon^2 m)$$

, όπου η πιθανότητα λαμβάνεται σε σχέση με τα τυχαία διανύσματα u_1, \dots, u_m .

Επιστρέφοντας στον φορμαλισμό που μας εξυπηρετεί, θα συμβολίσουμε την τυχαία προβολή ως πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με στοιχεία ανεξάρτητα ομοίως κατανομημένα (i.i.d) από την κατανομή $\mathcal{N}(0, 1/m)$. Ύστερα από εφαρμογή του παραπάνω θεωρήματος και της απλής ιδιότητας του πολλαπλασιαστικού μετασχηματισμού για γκαουσιανές τυχαίες μεταβλητές παίρνουμε το παρακάτω:

Σημείωση 1. Για κάθε $x \in \mathbb{R}^n$, υπάρχει σταθερά $c > 0$ τέτοια ώστε για $\epsilon \in (0, 1)$,

$$\mathbb{P} [\|Ax\|_2 \leq (1 - \epsilon)\|x\|_2 \text{ or } \|Ax\|_2 \geq (1 + \epsilon)\|x\|_2] \leq 3 \exp(-c\epsilon^2 m)$$

Η ιδιότητα διατήρησης της νόρμας που έχουν οι τυχαίες προβολές, θα πρέπει να μας θυμίζει τις ιδιότητες RIP και REC του προηγούμενου υποκεφαλαίου. Ένα σημαντικό σημείο που θέλει προσοχή, είναι ότι η ιδιότητα διατήρησης της νόρμας ισχύει όχι ντετερμινιστικά αλλά με μεγάλη πιθανότητα για ένα δεδομένο διάνυσμα x . Για να πάρουμε μία τέτοια ιδιότητα για ένα σύνολο διανυσμάτων θα πρέπει να γενικεύσουμε το θεώρημα με τεχνάσματα που θα μελετήσουμε στην συνέχεια της εργασίας.

Ας δούμε τώρα πώς μπορεί να εφαρμοστεί το παραπάνω θεώρημα σε συνθήκες που αφορούν πραγματικά σήματα. Η προβολή σε έναν χώρο μικρότερης διάστασης, όταν δηλαδή $m \ll n$, μπορεί να είναι πολύ χρήσιμη σε μία συνθήκη όπου έχουμε ένα μεγάλο σύνολο σημάτων (π.χ. το σύνολο δεδομένων για μία σύγχρονη εφαρμογή τεχνητής νοημοσύνης) και θέλουμε να κάνουμε υπολογισμούς με αυτά και να τα συσχετίζουμε με βάση την απόστασή τους. Σε έναν χώρο μικρότερης διάστασης ο υπολογισμός της απόστασης είναι πολύ πιο αποδοτικός και γι'αυτό η διατήρηση της πληροφορίας της αμοιβαίας απόστασης για ένα σύνολο διανυσμάτων θα ήταν πολύ σημαντική. Ωστόσο, εδώ ξέρουμε μόνο ότι για δεδομένο διάνυσμα x έχουμε διατήρηση του μήκους μέσω μίας τυχαίας προβολής. Το παρακάτω σπουδαίο λήμμα για τις τυχαίες προβολές μας δείχνει το πέρασμα από την διατήρηση του μήκους ενός διανύσματος με μεγάλη πιθανότητα στην διατήρηση των αποστάσεων για ένα σύνολο διανυσμάτων με μεγάλη πιθανότητα.

Λήμμα 2.1. *Johnson - Lindenstrauss Lemma.* Έστω $\epsilon \in (0, 1)$, ακέραιος N και η τυχαία προβολή $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με i.i.d στοιχεία $A_{ij} \sim \mathcal{N}(0, 1/m)$. Αν $m \geq \frac{3}{c\epsilon^2} \ln(N)$ για κάποια σταθερά $c > 0$, τότε για ένα σύνολο διανυσμάτων $S \subseteq \mathbb{R}^n$ με $|S| = N$ ισχύει:

$$(1 - \epsilon)\|x_i - x_j\|_2 \leq \|A(x_i - x_j)\|_2 \leq (1 + \epsilon)\|x_i - x_j\|_2$$

, για κάθε ζεύγος $x_i, x_j \in S$, με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \frac{3}{2N}$.

Απόδειξη. Θα εφαρμόσουμε την ιδιότητα 1 σε συνδυασμό με την τεχνική union bound . Τα πιθανά ζεύγη $x_i, x_j \in S$ έχουν πλήθος $\binom{N}{2} \leq \frac{N^2}{2}$. Έχουμε:

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}[\exists x_i, x_j \in S : \|A(x_i - x_j)\|_2 \leq (1 - \epsilon)\|(x_i - x_j)\|_2 \text{ or } \|A(x_i - x_j)\|_2 \geq (1 + \epsilon)\|(x_i - x_j)\|_2] \\ & \leq \sum_{i, j \neq j} \mathbb{P}[\|A(x_i - x_j)\|_2 \leq (1 - \epsilon)\|(x_i - x_j)\|_2 \text{ or } \|A(x_i - x_j)\|_2 \geq (1 + \epsilon)\|(x_i - x_j)\|_2] \\ & \leq \frac{N^2}{2} \cdot \mathbb{P}[\|A(x_i - x_j)\|_2 \leq (1 - \epsilon)\|(x_i - x_j)\|_2 \text{ or } \|A(x_i - x_j)\|_2 \geq (1 + \epsilon)\|(x_i - x_j)\|_2] \\ & \leq \frac{N^2}{2} 3 \exp(-c\epsilon^2 m) \leq \frac{N^2}{2} 3 \exp(-c\epsilon^2 \frac{3}{c\epsilon^2} \ln(N)) = \frac{3}{2N} \end{aligned}$$

Άρα: $\mathbb{P}[(1 - \epsilon)\|x_i - x_j\|_2 \leq \|A(x_i - x_j)\|_2 \leq (1 + \epsilon)\|x_i - x_j\|_2, \forall x_i, x_j \in S] \geq 1 - \frac{3}{2N}$. \square

Το παραπάνω θεώρημα ουσιαστικά μας λέει ότι μπορούμε να πραγματοποιήσουμε αποδοτικούς υπολογισμούς αποστάσεων για τα σήματα που ανήκουν σε ένα σύνολο S αφού τα προβάλουμε σε χώρο με σημαντικά μικρότερη διάσταση m .

Οι δύο παραπάνω προσεγγίσεις διαφέρουν στην ικανότητά τους να δώσουν μία καλή εκτίμηση \hat{z} για το αρχικό σήμα z , δηλαδή στην ικανότητα ανάκτησης. Για την προσέγγιση με ορθοκανονικές βάσεις, η εκτίμηση \hat{z} λαμβάνεται άμεσα από την συνοπτική αναπαράσταση \hat{a} ως $\hat{z} = \Psi\hat{a}$. Αντίθετα, στην προσέγγιση με τυχαίες προβολές έχουμε εύκολη συμπίεση και χρήσιμη για τους λόγους που εξηγήθηκαν παραπάνω, αλλά το πρόβλημα της ανάκτησης είναι σημαντικά πιο απαιτητικό καθώς έχει τη μορφή του compressed sensing .

Συνδυάζοντας τις δύο μεθόδους και τις ιδιότητές τους παίρνουμε μία οπτική του compressed sensing , όπως φαίνεται στην εικόνα 2.3, που δείχνει έναν τρόπο με τον οποίο η υπόθεση του «αραιού» (k -sparse) σήματος είναι ρεαλιστική.

$$\begin{aligned} \begin{array}{c} y \\ \hline \end{array} &= \begin{array}{c} \boxed{A} \\ m \times n \end{array} \begin{array}{c} z^* \\ \hline \end{array} \\ \begin{array}{c} y \\ \hline \end{array} &= \begin{array}{c} \boxed{A} \\ m \times n \end{array} \begin{array}{c} \boxed{\Psi} \\ n \times n \end{array} \begin{array}{c} x^* \\ \hline \begin{array}{l} k \\ n - k \end{array} \end{array} \end{aligned}$$

Σχήμα 2.3: Η συσχέτιση μεταξύ της αραιής αναπαράστασης ενός σήματος και του φορμαλισμού του compressed sensing.

Κεφάλαιο 3

Μηχανική Μάθηση, Νευρωνικά Δίκτυα και Γενετικά Μοντέλα

3.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα εισάγουμε τις τεχνικές μηχανικής μάθησης με τις οποίες θα προσπαθήσουμε να επιλύσουμε τα προβλήματα που μελετήσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο. Αρχικά, θα θέσουμε τις βάσεις για την μελέτη μεθόδων μηχανικής μάθησης και στη συνέχεια θα εστιάσουμε στα νευρωνικά δίκτυα, και πιο συγκεκριμένα εκείνα που χρησιμοποιούνται ως γενετικά μοντέλα.

3.2 Περί Τεχνικών Μηχανικής Μάθησης

Κάθε τεχνική μηχανικής μάθησης έχει δύο βασικά χαρακτηριστικά:

- Εφαρμόζεται σε ένα σύνολο από δεδομένα και
- διαχειρίζεται μοντέλα με εκπαιδευσιμες παραμέτρους.

Μία απλή συνθήκη στην οποία θα ήθελε κανείς να εφαρμόσει μία τεχνική μηχανικής μάθησης είναι η εξής:

Διαθέτουμε ένα σύνολο δεδομένων $D = \{(x^i, y^i)\}_{i=1}^N$, όπου $x^i \in \mathbb{R}^d$ και $y^i \in \mathbb{R}$. Με άλλα λόγια, το σημείο $x^i = [x_1^i \cdots x_d^i]^T$ περιγράφεται από d χαρακτηριστικά $x_j^i, j = 1 \cdots d$ ή features. Σε κάθε τέτοιο σημείο αντιστοιχεί μία απόκριση ή label y^i . Για παράδειγμα, ένα τέτοιο σημείο μπορεί να αναπαριστά ένα θηλαστικό ζώο και τα χαρακτηριστικά του μπορεί να είναι το ύψος, το βάρος, το χρώμα του τριχώματος κ.α. Αντίστοιχα, η απόκριση μπορεί να είναι το είδος του ζώου, αν είναι π.χ. γάτα, σκύλος ή αρκούδα. Σε μία τέτοια συνθήκη, θα θέλαμε να μάθουμε από το σύνολο δεδομένων D πώς να αντιστοιχίσουμε τα χαρακτηριστικά ενός θηλαστικού στην κατηγορία στην οποία ανήκει ώστε να μπορούμε να γενικεύσουμε την γνώση που μας δίνει το D και σε νέα δεδομένα, δηλαδή νέες περιπτώσεις θηλαστικών που μπορεί να συναντήσουμε στο μέλλον και ανήκουν σε κάποια από τις κατηγορίες που γνωρίζουμε από το σύνολο D . Για τον σκοπό αυτό, θα θέλαμε να δημιουργήσουμε ένα σύστημα ή συνάρτηση

αντιστοίχισης $C_w(\cdot) : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, που θα δέχεται ως είσοδο ένα σημείο x του χώρου \mathbb{R}^d , δηλαδή πληροφορίες για ένα θηλαστικό ζώο, και θα δίνει ως έξοδο y την κατηγορία στην οποία ανήκει. Το σύστημα $C_w(\cdot)$ θα πρέπει να μάθει μέσα από το σύνολο δεδομένων D έναν τρόπο αντιστοίχισης των χαρακτηριστικών ενός θηλαστικού στην κατηγορία όπου ανήκει. Πώς γίνεται όμως αυτό; Το σύστημα στο οποίο αναφερόμαστε αποτελεί μία υπολογιστική δομή με ένα σύνολο από εκπαιδεύσιμες παραμέτρους w , παραμέτρους δηλαδή που μπορούμε να προσαρμόσουμε σύμφωνα με το D και τον στόχο που θέλουμε να επιτυγχάνει το σύστημά μας. Πιο συγκεκριμένα, θα πρέπει να εκπαιδύσουμε το σύστημα $C_w(\cdot)$ επιλέγοντας τις τιμές των παραμέτρων w ώστε να βελτιστοποιείται (προσεγγιστικά) η ικανότητα του $C_w(\cdot)$ να πετυχαίνει τον στόχο της κατηγοριοποίησης των δεδομένων του D , με βάση κάποιο ποσοτικό κριτήριο επιτυχίας. Μέσα από αυτή την διαδικασία, αν

1. το σύστημά μας έχει κατάλληλη δομή,
2. πετύχουμε μία καλή βελτιστοποίηση των εκπαιδύσιμων παραμέτρων και
3. το σύνολο δεδομένων D είναι αντιπροσωπευτικό σε σχέση με τον κόσμο των θηλαστικών ζώων

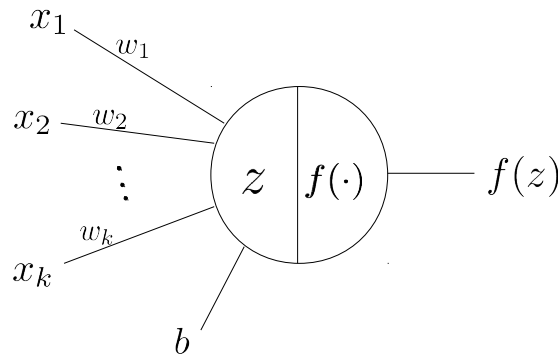
, τότε μπορούμε να ελπίζουμε ότι το τελικό σύστημα έχει μάθει να γενικεύει την ικανότητα της κατηγοριοποίησης για νέες περιπτώσεις θηλαστικών ζώων που ανήκουν σε μία από τις κατηγορίες που εμφανίζονται στο σύνολο δεδομένων D .

Η παραπάνω περιγραφή, απλουστεύει την μηχανική μάθηση εισάγοντας ωστόσο βασικές έννοιες όπως το πρόβλημα της κατηγοριοποίησης (classification) και η ιδιότητα της γενίκευσης (generalization). Φυσικά, δεν συζητήσαμε ουσιώδη θεωρητικά και πρακτικά σημεία του γνωστικού πεδίου της μηχανικής μάθησης. Για μία σφαιρική και πλήρη εισαγωγή στην μηχανική μάθηση ο αναγνώστης παραπέμπεται στο σύγγραμμα [8]. Στην συνέχεια, για τις ανάγκες της παρούσας εργασίας θα κάνουμε αυστηρή προσέγγιση μίας υποοικογένειας μεθόδων της μηχανικής μάθησης που χρησιμοποιούν νευρωνικά δίκτυα, εισάγοντας τυπικά όσες έννοιες θα μας είναι απαραίτητες.

3.3 Νευρωνικά Δίκτυα: Δομή και Εκπαίδευση

Τα (Τεχνητά) Νευρωνικά Δίκτυα (Neural Networks) είναι υπολογιστικές δομές ή συστήματα που αποτελούνται από υπολογιστικές μονάδες, τους νευρώνες. Οι νευρώνες συνδέονται μεταξύ τους και οργανώνονται σε επίπεδα. Ας δούμε αρχικά πώς μοιάζει ένας νευρώνας, στην εικόνα 3.1.

Θεωρούμε ότι ο νευρώνας λαμβάνει ως είσοδο το $x = [x_1 \cdots x_k]^T$, με k features. Τα $w_1 \cdots w_k$ και b είναι εκπαιδύσιμες παράμετροι και ονομάζονται βάρη (weights) και κλίση (bias), αντίστοιχα. Η είσοδος αλληλεπιδρά πολλαπλασιαστικά με τις παραμέτρους παράγοντας την ενδιάμεση έξοδο $z = \sum_{i=1}^k w_i x_i + b$. Η συνάρτηση $f(\cdot)$, ονομάζεται συνάρτηση ενεργοποίησης (activation function) και είναι αυτή που μπορεί να εισάγει μη γραμμικότητα στον τελικό υπολογισμό του νευρώνα. Πιο συγκεκριμένα, η τελική έξοδος του νευρώνα υπολογίζεται ως



Σχήμα 3.1: Ανατομία του νευρώνα.

$f(\sum_{i=1}^k w_i x_i + b)$, όπου $f(\cdot)$ κάποια πραγματική συνάρτηση. Κάποιες από τις πιο συνήθεις επιλογές για την συνάρτηση ενεργοποίησης είναι οι εξής:

- Η σιγμοειδής: $f(z) = \text{sigmoid}(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$
- Η υπερβολική εφαπτομένη: $f(z) = \text{tanh}(z) = \frac{e^z - e^{-z}}{e^z + e^{-z}}$
- Η ράμπα ή ReLU (Rectifier Linear Unit): $f(z) = \text{ReLU}(z) = \max(0, z)$
- Και η προσαρμογή της leakyReLU : $f(z) = \text{ReLU}(z) + \delta \times \min(0, z)$, όπου $0 < \delta \ll 1$ μια μικρή σταθερά.

Οι συναρτήσεις ενεργοποίησης όπως αναφέραμε εισάγουν μη-γραμμικότητα στον νευρώνα, με αποτέλεσμα να αυξάνουν τις υπολογιστικές του δυνατότητες. Η μη-γραμμικότητα είναι ιδιαίτερα σημαντική για την συνολική υπολογιστική δυνατότητα όταν οι νευρώνες οργανώνονται σε μεγαλύτερες δομές. Επίσης, οι συναρτήσεις ενεργοποίησης εισάγουν σημασιολογικές ιδιότητες στους νευρώνες. Για παράδειγμα, όταν ως συνάρτηση ενεργοποίησης χρησιμοποιείται η $\text{sigmoid}(\cdot)$ που παίρνει τιμές στο $[0, 1]$ μπορεί η έξοδος του νευρώνα να ερμηνευθεί ως πιθανότητα. Τέλος, ιδιαίτερη σημασία έχει η πρώτη παράγωγος μίας συνάρτησης ενεργοποίησης καθώς αυτή χρησιμοποιείται στην εκπαίδευση, όπως θα δούμε στη συνέχεια.

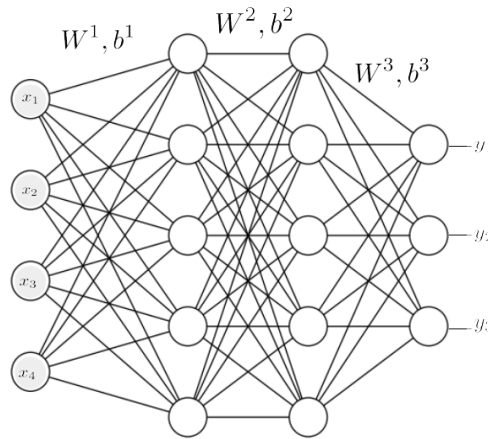
Όπως προαναφέρθηκε, ένα νευρωνικό δίκτυο είναι μία συλλογή νευρώνων που συνήθως οργανώνονται σε επίπεδα έτσι ώστε η συνολική έξοδος του ενός επιπέδου να είναι είσοδος του επόμενου επιπέδου. Πιο συγκεκριμένα, μία απλή δομή νευρωνικού δικτύου που ονομάζεται Feedforward νευρωνικό δίκτυο απεικονίζεται στο παραδειγμα 3.2. Με βάση το απλό παράδειγμα της εικόνας 3.2 θα δούμε πώς λειτουργεί ένα νευρωνικό δίκτυο και στη συνέχεια πώς εκπαιδεύεται.

Στο παράδειγμά μας, το πρώτο επίπεδο αποτελεί την είσοδο, στο \mathbb{R}^4 , και το τελευταίο αποτελεί την έξοδο, που σε αυτή την περίπτωση είναι τριών διαστάσεων δηλαδή στο \mathbb{R}^3 . Τα

ενδιάμεσα επίπεδα ονομάζονται «κρυφά» επίπεδα. Τα βάρη που συνδέουν το κάθε επίπεδο με το επόμενο συγκεντρώνονται στους πίνακες W^1, W^2, W^3 ενώ οι αντίστοιχες κλίσεις συγκεντρώνονται στα διανύσματα b^1, b^2, b^3 . Θα συμβολίζουμε την συνολική έξοδο κάθε επιπέδου με $a^l, l = 1, \dots, 4$. Επιπλέον, θα θεωρούμε ότι όλοι οι νευρώνες έχουν την ίδια συνάρτηση ενεργοποίησης $f(\cdot)$. Τότε δεδομένης της εισόδου $x = [x_1, x_2, x_3, x_4]^T$ υπολογίζουμε την έξοδο $y = [y_1, y_2, y_3]$ ως εξής:

1. Πρώτο επίπεδο: $a^1 \equiv x$.
2. Ενδιάμεση έξοδος δεύτερου επιπέδου: $z^2 = W^1 a^1 + b^1$. Συνολική έξοδος: $a^2 = f(z^2)$.
3. Ενδιάμεση έξοδος τρίτου επιπέδου: $z^3 = W^2 a^2 + b^2$. Συνολική έξοδος: $a^3 = f(z^3)$.
4. Ενδιάμεση έξοδος τέταρτου επιπέδου: $z^4 = W^3 a^3 + b^3$. Συνολική έξοδος: $y \equiv a^4 = f(z^4)$.

Ο παραπάνω αλγόριθμος γενικεύεται ανάλογα για κάθε νευρωνικό δίκτυο και ονομάζεται αλγόριθμος Forward Propagation.



Σχήμα 3.2: Απλή δομή ενός νευρωνικού δικτύου δύο «κρυφών» επιπέδων.

3.3.1 Αλγόριθμος Εκπαίδευσης ενός Νευρωνικού Δικτύου.

Στο παραπάνω παράδειγμα, θεωρήσαμε ένα νευρωνικό δίκτυο ως μία υπολογιστική δομή με συγκεκριμένες παραμέτρους $\{W^l\}_{l=1}^3, \{b^l\}_{l=1}^3$ και εξετάσαμε την λειτουργία του. Ωστόσο, για να προσδώσουμε στο νευρωνικό δίκτυο την ικανότητα να επιλύει ένα συγκεκριμένο πρόβλημα πρέπει να το εκπαιδεύσουμε χρησιμοποιώντας ένα σύνολο δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα, έστω το σύνολο δεδομένων $D = \{(x^i, y^i)\}_{i=1}^N$.

Ένας αλγόριθμος εκπαίδευσης είναι μία διαδικασία βελτιστοποίησης των παραμέτρων του νευρωνικού δικτύου με στόχο αυτό να επιλύει ένα συγκεκριμένο πρόβλημα. Ο στόχος της βελτιστοποίησης (objective) εκφράζεται από μία συνάρτηση κόστους $\mathcal{L}(W, b, D)$, όπου W, b

το σύνολο των βαρών και κλίσεων αντίστοιχα, η οποία αξιολογεί πόσο το νευρωνικό δίκτυο με παραμέτρους W, b πραγματοποιεί την αντιστοίχιση που περιγράφει το σύνολο δεδομένων D .

Η συνάρτηση κόστους δεν είναι κυρτή καθώς περιέχει το νευρωνικό δίκτυο που στο εσωτερικό του εμφανίζει μη-γραμμικότητα καθώς και μη-κυρτότητα. Ωστόσο, για να πετύχουμε την αποδοτική εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων προσεγγίζουμε το πρόβλημα σαν κυρτή βελτιστοποίηση [13], δεχόμενοι ότι η βελτιστοποίησή μας μπορεί να είναι προσεγγιστική. Εμπειρικά, συνήθως η προσέγγιση που πετυχαίνουμε είναι πολύ καλή έως και τέλεια καθώς είναι σύνηθες να καταλήγουμε με μηδενικό κόστος κατά το πέρας της εκπαίδευσης [25].

Πιο συγκεκριμένα, η βελτιστοποίηση/ελαχιστοποίηση της συνάρτησης κόστους πραγματοποιείται συνήθως με τον αλγόριθμο gradient descent, ή κάποια παραλλαγή του. Ο αλγόριθμος ουσιαστικά προσαρμόζει τις παραμέτρους ακολουθώντας την κατεύθυνση που δείχνει η παράγωγος της συνάρτησης κόστους ως προς κάθε παράμετρο. Αυτή η μέθοδος οδηγεί την ελαχιστοποίηση σε τοπικό ελάχιστο της συνάρτησης κόστους και συνεπώς προσφέρει μία προσεγγιστική ελαχιστοποίηση που εξαρτάται από την «ποιότητα» του τοπικού ελαχίστου. Πιο συνοπτικά, ακολουθείται η εξής μέθοδος:

- Αρχικοποιούμε τις παραμέτρους W^l, b^l . (π.χ. με τυχαίες τιμές $\sim \mathcal{N}(0, \epsilon^2)$, $\epsilon \sim 0.01$)
- Για ένα σύνολο επαναλήψεων ή εποχών:

$$\begin{aligned} - W^l &\leftarrow W^l - \rho \times \frac{\partial \mathcal{L}(W, b, D)}{\partial W^l} \\ - b^l &\leftarrow b^l - \rho \times \frac{\partial \mathcal{L}(W, b, D)}{\partial b^l} \end{aligned}$$

, όπου ρ καλείται ο ρυθμός μάθησης (learning rate).

Το πιο σημαντικό σημείο που επιτρέπει την αποδοτική εκπαίδευση ενός νευρωνικού δικτύου είναι ο υπολογισμός των παραγώγων $\frac{\partial \mathcal{L}(W, b, D)}{\partial W^l}$, $\frac{\partial \mathcal{L}(W, b, D)}{\partial b^l}$. Αρχικά, θεωρούμε ανεξάρτητα ομοίως κατανομημένα δεδομένα D (i.i.d) και έτσι έχουμε: $\frac{\partial \mathcal{L}(W, b, D)}{\partial W^l} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}(W, b, x^i, y^i)}{\partial W^l}$ και $\frac{\partial \mathcal{L}(W, b, D)}{\partial b^l} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{\partial \tilde{\mathcal{L}}(W, b, x^i, y^i)}{\partial b^l}$. Στην συνέχεια, για κάθε ζεύγος x^i, y^i , ο υπολογισμός της παραγώγου πραγματοποιείται με μία διαδικασία που ονομάζεται back propagation. Η διαδικασία βασίζεται στην απλή ιδιότητα αλυσίδας της παραγώγου (chain rule) ή :

$$\frac{\partial z}{\partial x} = \frac{\partial z}{\partial y} \cdot \frac{\partial y}{\partial x}.$$

Εφαρμόζοντας τον απλό κανόνα μέσα από τη συνάρτηση ενεργοποίησης κάθε νευρώνα και έπειτα μέσα από την σύνδεσή του με κάθε νευρώνα προηγούμενου επιπέδου, μπορούμε να διανείμουμε την πληροφορία της παραγώγου διαμέσου των επιπέδων του νευρωνικού δικτύου προσαρμόζοντας αναλόγως κάθε παράμετρο.

Για μία αναλυτική εισαγωγή στα νευρωνικά δίκτυα και την «βαθιιά» μάθηση προτείνεται το σύγγραμμα [23].

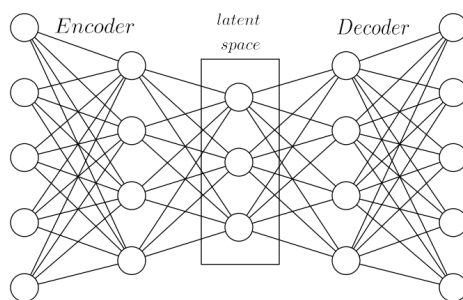
3.4 Αρχιτεκτονική Νευρωνικών Δικτύων

Η αρχιτεκτονική ενός νευρωνικού δικτύου σχετίζεται με το πώς οργανώνονται οι νευρώνες σε μεγαλύτερες υπολογιστικές δομές καθώς και με το πώς πραγματοποιούν τους υπολογισμο-

ύς. Θα εξηγήσουμε παρακάτω κάθε παράμετρο της αρχιτεκτονικής με σημαντικά παραδείγματα.

Μία σημαντική αρχιτεκτονική που αφορά τον τρόπο με τον οποίο οργανώνεται η υπολογιστική δομή ονομάζεται Auto-Encoder . Πρόκειται για μία δομή που αποτελείται από έναν κωδικοποιητή (Encoder) και έναν αποκωδικοποιητή (Decoder) μεταξύ των οποίων υπάρχει bottleneck πληροφορίας. Η δομή εικονίζεται στο σχήμα 3.3.

Πιο συγκεκριμένα, η αρχιτεκτονική αυτή λαμβάνει μία είσοδο και την κωδικοποιεί σε έναν χώρο μικρότερης διάστασης (latent space) , και στην συνέχεια η κωδικοποίηση αποκωδικοποιείται στον χώρο μεγαλύτερης διάστασης όπου ζει το σήμα, ή κάποιον άλλο χώρο μεγάλης διάστασης. Η εκπαίδευση μίας τέτοιας δομής ώστε να ανακατασκευάζει στην έξοδο το σήμα της εισόδου προσφέρει μία έξυπνη μέθοδο μείωσης της διάστασης (dimensionality reduction) καθώς πρέπει η κωδικοποίηση μικρής διάστασης στο bottleneck να διατηρεί την απαραίτητη πληροφορία για την ανακατασκευή του σήματος, επομένως μπορεί να θεωρηθεί ως μία αναπαράσταση του με σε λίγες διαστάσεις.



Σχήμα 3.3: Autoencoder

Από την άλλη πλευρά, ο τρόπος με τον οποίο τα νευρωνικά δίκτυα επεξεργάζονται την πληροφορία και κάνουν υπολογισμούς δεν έχει πάντα την απλή μορφή που είδαμε παραπάνω. Μία πολύ σημαντική αρχιτεκτονική που έχει αποδειχθεί ιδιαίτερα αποτελεσματική στην επεξεργασία εικόνων και γενικώς εφαρμογές της όρασης υπολογιστών είναι τα Συνελικτικά Νευρωνικά Δίκτυα (Convolutional Neural Networks) ή CNNs ([23]). Ένα CNN «μαθαίνει» ένα σύνολο από φίλτρα σε κάθε επίπεδο τα οποία εφαρμόζονται σε ένα σήμα συνήθως δύο και παραπάνω διαστάσεων. Κάθε φίλτρο επεξεργάζεται μία μικρή περιοχή του σήματος εισόδου κάθε φορά. Τα φίλτρα εφαρμόζονται σε όλη την έκταση του σήματος εισόδου με μία διαδικασία κυλιόμενου παραθύρου, η οποία ελέγχεται από μία παράμετρο βήματος (stride) που καθορίζει την θέση διαδοχικών εφαρμογών του φίλτρου. Η βασικότερη διαφορά ενός CNN με ένα Feedforward νευρωνικό δίκτυο είναι ότι το πρώτο είναι τοπικά συνδεδεμένο με βάρη σε αντίθεση με το δεύτερο που είναι ολικά συνδεδεμένο με την έννοια ότι κάθε μονάδα επεξεργασίας ή νευρώνας ενός επιπέδου συνδέεται με διαφορετικά βάρη με κάθε νευρώνα του προηγούμενου και του επόμενου επιπέδου. Αντίθετα οι εκπαιδευσιμες παράμετροι ενός φίλτρου είναι τοπικές στο φίλτρο αυτό και συμμετέχουν με τον ίδιο τρόπο σε κάθε υπολογισμό που αυτό εκτελεί.

Αυτός ο τρόπος διασύνδεσης επιτρέπει την αποδοτική επεξεργασία με πολύ μικρότερο

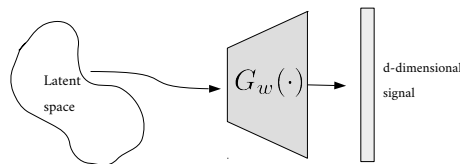
πλήθος εκπαιδύσιμων παραμέτρων. Επιπλέον, τα φίλτρα αξιοποιούν την τοπικότητα που εμφανίζεται σε ορισμένους τύπους δεδομένων, ιδιαίτερα εικόνες.

Ένα CNN οργανώνεται επίσης σε επίπεδα που συνήθως εμφανίζουν μια ιεραρχική δομή μετά την εκπαίδευση. Πιο συγκεκριμένα, τα φίλτρα των αρχικών επιπέδων συνήθως μαθαίνουν να αναγνωρίζουν δομή σε χαμηλό επίπεδο αφαίρεσης, π.χ. μία γραμμή ή μία γωνία, ενώ τα φίλτρα στα επόμενα επίπεδα ειδικεύονται σε πιο πολύπλοκη δομή, π.χ. έναν κύκλο ή μία σπείρα.

3.5 Σύγχρονα Γενετικά Μοντέλα

Μία σύγχρονη εφαρμογή των νευρωνικών δικτύων που θα μας απασχολήσει ιδιαίτερα είναι η κατασκευή γενετικών μοντέλων. Περιγραφικά, η λειτουργία ενός γενετικού μοντέλου (generative model) συνίσταται στη δημιουργία νέων δειγμάτων που ανήκουν σε κάποια οικογένεια δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα, ένα γενετικό μοντέλο θεωρείται ότι αποτελεί αναπαράσταση της κατανομής των δεδομένων που συγκροτούν μία οικογένεια. Μια οικογένεια δεδομένων μπορεί να είναι οι έγχρωμες εικόνες ανθρώπινων προσώπων, η πλήρης συλλογή τραγουδιών των Nirvana ή το σύνολο των σημάτων που λαμβάνονται από αισθητήρες κίνησης.

Ακολουθώντας την λογική των μεθόδων μηχανικής μάθησης με νευρωνικά δίκτυα, θα θέλαμε να εκπαιδεύσουμε ένα τέτοιο σύστημα με ένα σύνολο δεδομένων που είναι αντιπροσωπευτικό για την οικογένεια δεδομένων που μας ενδιαφέρει. Μετά την επιτυχή εκπαίδευση θα θέλαμε το σύστημα να λειτουργεί ως γενετικό μοντέλο, καθώς έχει μάθει πώς «μοιάζει» η κατανομή της οικογένειας δεδομένων που μας αφορά και μπορεί να λαμβάνει δείγματα από αυτήν και να μας τα παρέχει. Πιο συγκεκριμένα, θα θεωρούμε ως γενετικό μοντέλο τη συνάρτηση $G : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^d$, η οποία συγκροτείται από παραμέτρους που έχουν βελτιστοποιηθεί με μία διαδικασία εκπαίδευσης. Το πεδίο ορισμού της συνάρτησης $S = \mathbb{R}^k$ θα καλείται πεδίο κωδικοποίησης ή latent space ενώ το πεδίο τιμών $G(S)$ θα καλείται πεδίο αναπαράστασης. Με άλλα λόγια, το γενετικό μοντέλο $G(\cdot)$ θα λαμβάνει μία κωδικοποίηση με την μορφή ενός διανύσματος στο \mathbb{R}^k και θα έχει την ικανότητα να την μετασχηματίζει σε ένα δείγμα της οικογένειας δεδομένων που έχει μάθει, η οποία ζει ως υποσύνολο του \mathbb{R}^d .



Σχήμα 3.4: Οπτικοποίηση ενός γενετικού μοντέλου.

Η κατασκευή ενός γενετικού μοντέλου είναι ενδιαφέρον πρόβλημα καθώς μία προσέγγιση που επιχειρεί να χαρακτηρίσει σαφώς μία οικογένεια δεδομένων, με κάποια σχετικά ευρεία έννοια, συνήθως δεν είναι υπολογιστικά εφικτή. Αντίθετα, μία προσέγγιση με νευρωνικά

δίκτυα μας επιτρέπει να βελτιστοποιήσουμε ένα σύστημα αναπαράστασης με τέτοιο τρόπο ώστε αυτό να «ανακαλύψει» έμμεσα τον χαρακτηρισμό της οικογένειας δεδομένων μέσα από τον όγκο δεδομένων που λαμβάνει για την εκπαίδευση. Υπάρχουν διαφορετικές προσεγγίσεις για την κατασκευή γενετικών μοντέλων με νευρωνικά δίκτυα, ανάλογα με το μοντέλο εκπαίδευσης που επιλέγεται. Παρακάτω θα δούμε τις βασικότερες από αυτές:

- Variational Auto-Encoders (VAEs)

Το μοντέλο VAE προκύπτει άμεσα από την αρχιτεκτονική Auto-Encoder που αναλύθηκε στην προηγούμενη παράγραφο. Το μοντέλο VAE βασίζεται στην παρατήρηση ότι η αρχιτεκτονική Auto-Encoder μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως γενετικό μοντέλο ως εξής: Μπορούμε να εκπαιδύσουμε το μοντέλο με ένα σύνολο δεδομένων μίας οικογένειας προκειμένου να κάνει ανακατασκευή της εισόδου. Με αυτόν τον τρόπο ο Decoder «μαθαίνει» να αποκωδικοποιεί το latent space σε σήματα που ανήκουν στην οικογένεια των σημάτων που χρησιμοποιήθηκαν για την εκπαίδευση. Στην συνέχεια, ο Decoder μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως γενετικό μοντέλο ή Generator λαμβάνοντας είσοδο από το latent space και παράγοντας νέα δείγματα της οικογένειας σημάτων.

Ωστόσο, με την κλασική διαδικασία εκπαίδευσης ενός Auto-Encoder δεν περιορίζεται το latent space δομικά ή/και σημασιολογικά. Για τον λόγο αυτό η τελική του μορφή μπορεί να είναι ακανόνιστη και συνεπώς να μην επιτρέπει ασφαλή δειγματοληψία, η οποία είναι απαραίτητη για την γενετική διαδικασία. Το μοντέλο VAE διαφέρει από έναν απλό Auto-Encoder καθώς εισάγει δομή στο latent space . Με άλλα λόγια, σε ένα VAE ο Encoder δεν κατασκευάζει μία κωδικοποίηση για κάθε είσοδο αλλά μία κατανομή πιθανότητας πάνω στο latent space προσδίδοντας έτσι δομή σε αυτό. Επίσης, η διαδικασία εκπαίδευσης προσαρμόζεται αναλόγως με βάση τεχνικές από την προϋπάρχουσα θεωρία για variational inference [9].

Στην παρούσα εργασία δεν θα χρησιμοποιήσουμε το μοντέλο αυτό καθώς δεν θεωρείται ενδεδειγμένο για τις περισσότερες εφαρμογές. Το μοντέλο VAE παρουσιάζεται αναλυτικά στις εργασίες [35, 36]

- Generative Adversarial Networks (GANs)

Τα GANs είναι μία διαφορετική μέθοδος για την κατασκευή γενετικών μοντέλων που βασίζεται σε ένα πολύ διαφορετικό πρότυπο εκπαίδευσης από αυτά που έχουμε δει ως τώρα [24]. Στην εκπαίδευση συμμετέχουν δύο νευρωνικά δίκτυα: Το πρώτο, ο Generator , λειτουργεί σαν γενετικό μοντέλο παράγοντας νέα δείγματα από μία οικογένεια σημάτων. Το δεύτερο , ο Discriminator , αξιολογεί τα δείγματα για το αν είναι πραγματικά, δηλαδή ανήκουν στο σύνολο δεδομένων για εκπαίδευση, ή είναι κατασκευασμένα από τον Generator . Συνολικά η εκπαίδευση ομοιάζει με zero-sum game με τον Generator να προσπαθεί να πείσει τον Discriminator ότι τα δείγματα που παράγει είναι πραγματικά δεδομένα (γενετική διαδικασία) και τον Discriminator να προσπαθεί να διακρίνει αποτελεσματικά μεταξύ πραγματικών και κατασκευασμένων δειγμάτων (διαδικασία κατηγοριοποίησης).

Επιγραμματικά τα βήματα της εκπαίδευσης είναι τα ακόλουθα:

1. Ο Generator λαμβάνει τυχαίες κωδικοποιήσεις από το προεπιλεγμένο latent space και παράγει ένα σύνολο κατασκευασμένων δειγμάτων.
2. Τα κατασκευασμένα δείγματα γίνονται ως είσοδο στον Discriminator μαζί με ένα σύνολο πραγματικών δεδομένων από το σύνολο δεδομένων που χρησιμοποιείται για την εκπαίδευση.
3. Ο Discriminator κατηγοριοποιεί όλα τα δείγματα που λαμβάνει, πραγματικά και κατασκευασμένα, επιστρέφοντας για κάθε δείγμα μία τιμή p μεταξύ 0 και 1, που αποτελεί την εκτίμηση για την πιθανότητα αυτό το δείγμα να είναι πραγματικό.
4. Ο Discriminator βελτιστοποιείται, με ένα βήμα back propagation όπως έχουμε δει παραπάνω, ώστε να πετυχαίνει σωστή κατηγοριοποίηση.
5. Ο Generator βελτιστοποιείται με τον αντίστροφο στόχο, δηλαδή να εξαπατήσει τον Discriminator . Αυτό πετυχαίνεται με ένα βήμα back propagation του αντίστοιχου κόστους, όπου η πληροφορία της παραγωγού διανέμεται διαμέσου του νευρωνικού δικτύου του Discriminator .

Ο στόχος της παραπάνω διαδικασίας διατυπώνεται αυστηρά στην παρακάτω παράσταση που αναλογεί στην εκπαίδευση ενός GAN .

$$\max_G \min_D \frac{1}{2} (\mathbb{E}_{x \sim p_t} [1 - D(x)] + \mathbb{E}_{z \sim p_z} [D(G(z))])$$

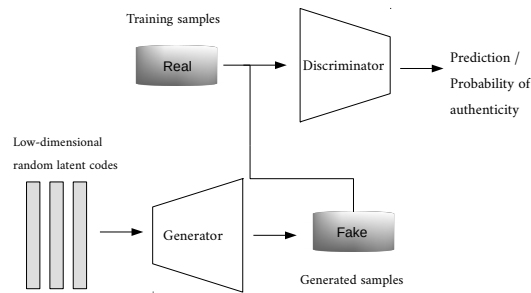
, όπου G είναι το νευρωνικό δίκτυο του Generator , D το νευρωνικό δίκτυο του Discriminator , $x \sim p_t$ η διαδικασία δειγματοληψίας από τα πραγματικά δεδομένα για εκπαίδευση και $z \sim p_z$ η διαδικασία δειγματοληψίας από το latent space .

Η ιδέα που διέπει τα GANs προέκυψε από την αδυναμία εύρεσης μίας παραγωγίσιμης συνάρτησης κόστους που να χαρακτηρίζει πλήρως μία οικογένεια σημάτων. Έτσι αντί για μία πολύ περίπλοκη συνάρτηση κόστους που προσπαθεί να πετύχει αποτελεσματική αξιολόγηση, ειδικά για δεδομένα όπως εικόνες και ήχος που αξιολογούνται από την ανθρώπινη εμπειρία, ένα νευρωνικό δίκτυο αξιοποιείται και εκπαιδεύεται κατά τη διάρκεια της διαδικασίας ώστε να αξιολογεί τα κατασκευασμένα δεδομένα σε σύγκριση με τα πραγματικά.

Τέλος, ο Generator μετά την σύγκλιση της διαδικασίας της εκπαίδευσης μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως γενετικό μοντέλο, λαμβάνοντας ως είσοδο τυχαίες κωδικοποιήσεις που δειγματοληφτούνται από το latent space .

Αξίζει να σημειωθεί ότι η εκπαίδευση των GANs παρουσιάζει πολλές πρακτικές δυσκολίες καθώς στόχος είναι η σύγκλιση της εκπαίδευσης σε σημείο ισορροπίας του zero-sum game σε συνδυασμό με την αστάθεια που παρουσιάζει η εκπαίδευση των νευρωνικών δικτύων. Έχουν προταθεί πολλές επεκτάσεις προκειμένου να αντιμετωπιστεί αυτό και άλλα προβλήματα που αφορούν την εκπαίδευση των GANs .

- Generative Latent Optimization (GLO)

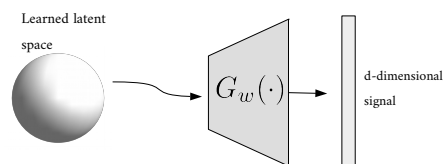


Σχήμα 3.5: Διαδικασία εκπαίδευσης ενός GAN .

Η μέθοδος GLO ([11]) έχει προταθεί ως μία επιλογή με εμπειρικά πολύ λιγότερο ασταθή εκπαίδευση σε σχέση με τα GANs . Στην μέθοδο GLO , ένα νευρωνικό δίκτυο ή Generator εκπαιδεύεται ως γενετικό μοντέλο συγχρόνως με την βελτιστοποίηση του χώρου κωδικοποίησης (latent space) από τον οποίο λαμβάνει την είσοδό του. Πιο συγκεκριμένα, ο Generator καλείται να ανακατασκευάζει δείγματα του συνόλου δεδομένων για εκπαίδευση, ενώ συγχρόνως η πληροφορία της παραγωγού διανέμεται μέσω του Generator στην ίδια την κωδικοποίηση. Η κωδικοποίηση κάθε δείγματος του συνόλου δεδομένων «μαθαίνεται» παράλληλα με την εκπαίδευση του Generator δομώντας έτσι εμμέσως το latent space σε σχέση με την προβολή του στο πεδίο αναπαράστασης μέσω του Generator . Στόχος είναι να επιτευχθεί μία αποτελεσματική διαμόρφωση της δομής του latent space που απεικονίζεται μέσα από την προβολή που πραγματοποιεί ο Generator στο πεδίο αναπαράστασης. Στην συνέχεια, η δομή του latent space μπορεί να γενικευτεί με την παραγωγή νέων δειγμάτων. Η διαδικασία της εκπαίδευσης περιγράφεται από την παρακάτω βελτιστοποίηση:

$$\min_G \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \min_{z_i \in \text{latent space}} (\mathcal{L}(G(z_i), x_i))$$

, όπου G είναι το νευρωνικό δίκτυο του Generator , $\{x_i, z_i\}_{i=1}^N$ τα δεδομένα για εκπαίδευση και οι αντίστοιχες κωδικοποιήσεις και $\mathcal{L}(\cdot)$ η συνάρτηση κόστους που παρέχει την αξιολόγηση της ανακατασκευής κάθε δείγματος x_i .



Σχήμα 3.6: Γενετικό μοντέλο που έχει εκπαιδευτεί με την διαδικασία Generative Latent Optimization .

3.6 Η Μηχανική Μάθηση ως Αντίστροφο Πρόβλημα

Μία ενδιαφέρουσα οπτική της Μηχανικής Μάθησης είναι η ερμηνεία της ως επίλυση αντίστροφων προβλημάτων. Πράγματι, στους αλγορίθμους μηχανικής μάθησης λαμβάνουμε ένα σύνολο δεδομένων, τα επεξεργαζόμαστε με βάση ορισμένες υποθέσεις που αφορούν την δομή του προβλήματος και εξάγουμε γνώση που ιδανικά πρέπει να γενικεύει σε νέα άγνωστα δεδομένα της ίδιας φύσης. Αυτή η οπτική αναδεικνύει τον δρόμο προς το regularization theory και αναλύεται στην εργασία [54], ωστόσο δεν θα επεκταθούμε εδώ καθώς το θέμα ξεφεύγει από το πεδίο ενδιαφέροντος της παρούσας εργασίας.

Κεφάλαιο 4

Χρησιμοποιώντας Νευρωνικά Δίκτυα σε Αντίστροφα Προβλήματα

4.1 Εισαγωγή

Στο παρόν κεφάλαιο, θα μελετήσουμε της σύγχρονες μεθόδους επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων που βασίζονται σε νευρωνικά δίκτυα. Επιπλέον, θα αναδείξουμε τα βασικά σημεία που διέπουν την θεωρητική θεμελίωση της μεθόδου την οποία θα αξιοποιήσουμε στη συνέχεια.

4.2 Διαφορετικές Προσεγγίσεις

Μία από τις σύγχρονες και αποτελεσματικές προσεγγίσεις επίλυσης πραγματικών αντίστροφων προβλημάτων συνδυάζει τεχνικές βελτιστοποίησης με μηχανική μάθηση σε μία προσπάθεια να χρησιμοποιηθεί γνώση από συλλογές δεδομένων για επίλυση προβλημάτων που προκύπτουν από έλλειψη ή διάβρωση δεδομένων. Πιο συγκεκριμένα, η επιστημονική κοινότητα χρησιμοποιεί νευρωνικά δίκτυα για αυτό τον σκοπό, λόγω της ξεχωριστής ιδιότητάς τους να επεξεργάζονται στατιστικά ή αλλιώς να εκπαιδεύονται με σχετικά αποδοτικό τρόπο από μεγάλους όγκους δεδομένων. Στην σύγχρονη έρευνα, τα νευρωνικά δίκτυα έχουν αποδειχτεί χρήσιμες υπολογιστικές δομές με ενδιαφέρουσες ιδιότητες και σαν τέτοιες έχουν χρησιμοποιηθεί και ως δομικοί περιορισμοί σε επίλυση αντίστροφων προβλημάτων. Στο παρόν κεφάλαιο θα μελετήσουμε και θα προσπαθήσουμε να εφαρμόσουμε κάποιες από αυτές τις μεθόδους.

4.2.1 Μέθοδοι που βασίζονται σε Γενετικά Μοντέλα

Ως σημείο αναφοράς για την οικογένεια μεθόδων που θα μελετήσουμε σε αυτή την παράγραφο θα χρησιμοποιηθεί η απόπειρα χρήσης γενετικών μοντέλων για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων της εργασίας [12]. Πιο συγκεκριμένα, σε αυτή την εργασία μελετήθηκε το

γνωστό μας compressed sensing και η επίλυσή του με την υπόθεση ύπαρξης ενός γενετικού μοντέλου, που εκφράζεται μέσω ενός κατάλληλα εκπαιδευμένου νευρωνικού δικτύου. Το εν λόγω γενετικό μοντέλο πρέπει να μοντελοποιεί την κατανομή της οικογένειας σημάτων στην οποία ανήκει το άγνωστο σήμα x^* που υποθέτει το δεδομένο πρόβλημα compressed sensing. Για παράδειγμα, στην περίπτωση που το x^* αποτελεί ένα πλήρες MRI scan κάποιου εγκεφάλου και εμείς λαμβάνουμε ελλιπείς μετρήσεις y από αυτό, θα θέλαμε να χρησιμοποιήσουμε την γνώση ενός γενετικού μοντέλου εκπαιδευμένου με ένα αρκετά μεγάλο σύνολο από πλήρη MRI scans ώστε να μπορέσουμε να ανακτήσουμε το άγνωστο σήμα x^* από τις μετρήσεις y .

Η μέθοδος ανάκτησης προκύπτει ευθέως από τον τρόπο λειτουργίας ενός γενετικού μοντέλου: ένα γενετικό μοντέλο $G(\cdot)$ αποτελεί ένα υπολογιστικό μοντέλο που έχει την ικανότητα να λαμβάνει μία κωδικοποίηση μικρής διάστασης, έστω z , που ζει στο πεδίο κωδικοποίησης του μοντέλου (latent space) και να την αντιστοιχίζει σε ένα πολυδιάστατο σήμα στο πεδίο αναπαράστασης του μοντέλου. Επομένως, για την επίλυση ενός προβλήματος compressed sensing δεδομένου ενός γενετικού μοντέλου $G(\cdot)$ και μετρήσεων y , αρκεί να βρούμε μια κατάλληλη αναπαράσταση \hat{z} η οποία να κωδικοποιεί ένα σήμα \hat{x} που συμφωνεί με τις δεδομένες μετρήσεις y . Η πιο αυστηρά:

Έστω ένα γενετικό μοντέλο $G : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$, όπου k η διάσταση του πεδίου κωδικοποίησης του μοντέλου. Έστω επίσης οι, πιθανώς θορυβώδεις, μετρήσεις y που λαμβάνονται με γραμμικό τρόπο μέσω του πίνακα A από ένα άγνωστο σήμα x^* (compressed sensing). Μπορούμε να ανακτήσουμε το άγνωστο σήμα x^* λαμβάνοντας μία εκτίμηση $\hat{x} = G(\hat{z})$, όπου:

$$\hat{z} = \arg \min_{z \in \mathbb{R}^k} \|y - AG(z)\|_2 \quad (4.1)$$

Γνωρίζουμε ήδη ότι αν το μοντέλο G έχει την μορφή ενός νευρωνικού δικτύου, η βελτιστοποίηση που απαιτείται στην προσέγγιση επίλυσης 4.1 δεν είναι κυρτή και συνεπώς δεν υπάρχει μοναδική λύση. Ωστόσο, με τις τεχνικές που αναλύσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο (back propagation) μπορούμε να βρούμε μία λύση αποδοτικά η οποία μπορούμε να περιμένουμε, από εμπειρικά στοιχεία, ότι θα πετυχαίνει μία καλή προσεγγιστική ελαχιστοποίηση.

Στην εργασία [12] παρουσιάζεται και εξετάζεται πειραματικά η μέθοδος, με χρήση διαφορετικών γενετικών μοντέλων (GANs και VAEs) και διαφορετικών τύπων δεδομένων. Σε αυτή την ερευνητική κατεύθυνση έχουν προκύψει επεκτάσεις προσαρμόζοντας στις ανάγκες του προβλήματος την εκπαίδευση του γενετικού μοντέλου [32] καθώς και την αρχιτεκτονική του [40] ή χρησιμοποιώντας ριζικά διαφορετικά γενετικά μοντέλα [11].

4.2.2 Μέθοδοι που βασίζονται σε Δομικούς Περιορισμούς μέσω Νευρωνικών Δικτύων

Μια διαφορετική ερευνητική κατεύθυνση για την χρήση νευρωνικών δικτύων στην επίλυση αντίστροφων προβλημάτων αφορμάται από την υπόθεση/εμπειρική παρατήρηση ότι ορισμένες αρχιτεκτονικές νευρωνικών δικτύων είναι προσαρμοσμένες και ιδιαίτερα αποτελεσματικές για ορισμένους τύπους δεδομένων, για παράδειγμα η επιστημονική κοινότητα διερευνά την υπόθεση ότι οι convolutional αρχιτεκτονικές (CNNs) έχουν μεγαλύτερη αποτελεσματικότητα με

φυσικές εικόνες, καθώς αυτές παρουσιάζουν τοπική εξάρτηση και ομοιομορφία την οποία εκμεταλλεύεται η αρχιτεκτονική. Αυτή η παρατήρηση αφορά και ευθεία προβλήματα (π.χ. κατηγοριοποίηση) αλλά και αντίστροφα (π.χ. γενετική μοντελοποίηση) ενώ το αν είναι αληθής και απο ποιόν ακριβή μηχανισμό προκύπτει είναι άγνωστο πεδίο στο οποίο δραστηριοποιείται η σύγχρονη έρευνα [26].

Η μέθοδος ανάκτησης σήματος με χρήση ενός νευρωνικού δικτύου ως δομικό περιορισμό συνοψίζεται ως εξής:

Έστω ένα υπολογιστικό μοντέλο (με την μορφή νευρωνικού δικτύου) $G(\cdot; w) : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$, όπου w το σύνολο των εκπαιδευσιμων παραμέτρων του μοντέλου. Έστω επίσης οι, πιθανώς θορυβώδεις, μετρήσεις y που λαμβάνονται με γραμμικό τρόπο μέσω του πίνακα A από ένα άγνωστο σήμα x^* (compressed sensing). Με $z \in \mathbb{R}^k$ σταθερή είσοδο στο υπολογιστικό μοντέλο, μπορούμε να μάθουμε ένα σύνολο παραμέτρων \hat{w} έτσι ώστε να ανακτήσουμε το άγνωστο σήμα x^* λαμβάνοντας μία εκτίμηση $\hat{x} = G(z; \hat{w})$, όπου:

$$\hat{w} = \arg \min_w \|y - AG(z; w)\|_2 \quad (4.2)$$

Η πρώτη ερευνητική εργασία που πρότεινε ότι η παρατήρηση αυτή μπορεί να οδηγήσει σε μεθόδους επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων είναι η [48] που αφορά CNNs και φυσικές εικόνες. Πιο συγκεκριμένα, η μέθοδος προτείνεται για ανάκτηση εικόνας από την οποία θεωρούμε ότι λαμβάνουμε μόνο ένα σύνολο από pixels ή μία θορυβώδη εκδοχή της. Σε αυτή την εργασία, δείχνεται ότι κατά τη μάθηση των παραμέτρων \hat{w} με την βελτιστοποίηση 4.2 για ένα CNN με σταθερή είσοδο, η έξοδος προσεγγίζει ταχύτερα την εικόνα-στόχο και έπειτα την θορυβώδη ή ελλιπή εκδοχή της. Έτσι, μπορεί κανείς να διακόψει πρόωρα την εκπαίδευση και να λάβει μία καλή εκτίμηση της εικόνας-στόχου. Άλλες προσεγγίσεις αφορούν διαφορετικές αρχιτεκτονικές και τύπους δεδομένων, π.χ. γράφους [44], ενώ μελέτη προς κάποιες τυπικές εγγυήσεις έχει παρουσιαστεί στις εργασίες [50], [30] και [26] χωρίς όμως η μέθοδος να έχει χαρακτηριστεί πλήρως και με αυστηρό τρόπο. Ένα σημαντικό σημείο είναι ότι η μέθοδος δεν χρησιμοποιεί μηχανική μάθηση από ένα σύνολο δεδομένων αλλά βελτιστοποίηση ενός νευρωνικού δικτύου με χρήση μόνο των μετρήσεων y . Σε αυτή την περίπτωση, το νευρωνικό δίκτυο λειτουργεί ως δομικός περιορισμός καθώς η εκτίμηση \hat{x} πρέπει να ικανοποιεί την δομική υπόθεση $\hat{x} = G(z; \hat{w})$ για κάποιο σύνολο παραμέτρων \hat{w} .

4.2.3 Υβριδικές Μέθοδοι

Τέλος, έχουν προταθεί υβριδικές προσεγγίσεις για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων με νευρωνικά δίκτυα, οι οποίες συνδυάζουν μηχανική μάθηση από ένα σύνολο δεδομένων της οικογένειας στην οποία ανήκει το άγνωστο σήμα προς ανάκτηση με άμεση βελτιστοποίηση παραμέτρων του νευρωνικού δικτύου.

Πιο συγκεκριμένα, στην εργασία [50] προτάθηκε ο συνδυασμός της μεθόδου βελτιστοποίησης 4.2 με έναν κατάλληλα ορισμένο επιπλέον όρο. Η μέθοδος λαμβάνει την εκτίμηση $\hat{x} = G(z; \hat{w})$ όπου:

$$\hat{w} = \arg \min_w \|y - AG(z; w)\|_2 + \mathcal{R}(w; \psi)$$

, όπου ψ) είναι ένα σύνολο παραμέτρων που λαμβάνονται με μηχανική μάθηση από ένα (μικρό) σύνολο δεδομένων της οικογένειας στην οποία ανήκει το άγνωστο σήμα x^* .

Από την άλλη πλευρά, στην εργασία [3] συνδυάζονται οι μέθοδοι 4.1 και 4.2 σε μία βελτιστοποίηση που υποθέτει την ύπαρξη ενός γενετικού μοντέλου $G(\cdot)$ όπως ορίστηκε παραπάνω. Ωστόσο, σε αυτή την μέθοδο δεν βελτιστοποιείται απευθείας η κωδικοποίηση z αλλά αυτή παραμετροποιείται από ένα νευρωνικό δίκτυο $f(s; \phi)$ με σταθερή είσοδο s και στη συνέχεια βελτιστοποιούνται οι εκπαιδευσιμες παράμετροι ϕ . Δηλαδή, λαμβάνουμε εκτίμηση $\hat{x} = G(f(s; \hat{\phi}))$, όπου:

$$\hat{\phi} = \arg \min_{\phi} \|y - AG(f(s; \phi))\|_2.$$

Οι παραπάνω μέθοδοι αναφέρονται για λόγους πληρότητας. Στη συνέχεια, θα εστιάσουμε σε μεθόδους που χρησιμοποιούν γενετικά μοντέλα. Οι μέθοδοι αυτές παρουσιάζουν την καλύτερη απόδοση καθώς χρησιμοποιούν γνώση από μεγάλο όγκο δεδομένων που επιτυγχάνεται με μηχανική μάθηση. Επιπλέον, είναι διαισθητικά πιο κατανοητές και χρησιμοποιούν τα καλύτερα σύγχρονα εργαλεία της μηχανικής μάθησης για την επίλυση των προβλημάτων που μας αφορούν.

4.3 Θεωρητική Ανάλυση

Σε αυτή την παράγραφο θα εστιάσουμε στην θεωρητική ανάλυση της μεθόδου επίλυσης αντίστροφων προβλημάτων με την υπόθεση ύπαρξης ενός γενετικού μοντέλου, η οποία παρουσιάστηκε στην εργασία [12] για την ειδική περίπτωση του compressed sensing με ανεξάρτητες τυχαίες μετρήσεις. Η ανάλυση λαμβάνει τις βασικές της ιδέες από την κλασική προσέγγιση με την δομική υπόθεση του «αραιού» σήματος που συζητήσαμε εκτενώς στο δεύτερο κεφάλαιο αυτής της εργασίας. Πιο συγκεκριμένα, όπως ακριβώς και στο δεύτερο κεφάλαιο, ο στόχος της ανάλυσης είναι να πάρουμε ένα άνω φράγμα για το σφάλμα ανάκτησης $\|x^* - \hat{x}\|_2$, όπου \hat{x} η εκτίμηση που λαμβάνουμε επιλύοντας το compressed sensing με την μέθοδο 4.1, δηλαδή $\hat{x} = G(\hat{z})$. Ας θυμηθούμε τη συλλογιστική που ακολουθήσαμε στην εξαγωγή του φράγματος για το σφάλμα ανάκτησης για την εκτίμηση LASSO :

1. Αρχικά παρατηρήσαμε γεωμετρικά ότι θέλουμε η συνάρτηση κόστους να παρουσιάζει ισχυρή κυρτότητα στις κατευθύνσεις που ορίζονται από το άγνωστο σήμα x^* και κάθε άλλο «αραιό» σήμα που μπορεί να αποτελεί εκτίμηση LASSO .
2. Έπειτα ορίσαμε την ιδιότητα REC που ισοδυναμεί με αυτή ακριβώς την συμπεριφορά για την συνάρτηση κόστους LASSO .
3. Τέλος, χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα REC για το διάνυσμα που ορίζει την κατεύθυνση ενδιαφέροντος $\hat{z} = x^* - \hat{x}$ για να αποδείξουμε το επιθυμητό άνω φράγμα.

Η ιδιότητα REC δείχνεται για τον πίνακα μετρήσεων και ένα σύνολο διανυσμάτων, που στην περίπτωση μας ήταν το σύνολο των «αραιών» διανυσμάτων. Όμως για την απόδειξη του φράγματος χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα REC για την διαφορά $\hat{z} = x^* - \hat{x}$, η οποία είναι

επίσης ένα «αραιό» διάνυσμα εφόσον τα x^* και \hat{x} είναι από υπόθεση (σχεδόν) k -sparse . Αν προσπαθήσουμε να χρησιμοποιήσουμε την ιδιότητα REC με τον ίδιο τρόπο για την νέα προσέγγιση επίλυσης 4.1 θα πρέπει αυτή να αφορά το σύνολο $S \subseteq \mathbb{R}^n$ όλων των σημάτων που βρίσκονται στο πεδίο αναπαράστασης του γενετικού μοντέλου G καθώς αυτά αποτελούν πιθανές εκτιμήσεις από την επίλυση του 4.1. Ωστόσο, τίποτα δεν μας εγγυάται ότι αν δύο σήματα βρίσκονται στο S τότε και η διαφορά τους θα βρίσκεται στο S όπως συμβαίνει με το σύνολο των «αραιών» διανυσμάτων. Μάλιστα, αν σκεφτούμε το παράδειγμα ενός γενετικού μοντέλου που αναπαριστά την κατανομή των εικόνων των πραγματικών προσώπων, τότε η διαφορά δύο σημάτων στο S που αντιστοιχούν σε δύο πραγματικά πρόσωπα ανθρώπων θα είναι πιθανότατα μία εικόνα που δεν θα μοιάζει με πρόσωπο και θα βρίσκεται συνεπώς εκτός του S . Οι ερευνητές που πρότειναν την μέθοδο 4.1 ([12]) όρισαν για την ανάλυσή της μεθόδου μία παραλλαγή της ιδιότητας REC που μας επιτρέπει να αναφερόμαστε στην διαφορά δύο σημάτων ενδιαφέροντος και συνεπώς μπορούμε να την χρησιμοποιήσουμε για την εξαγωγή του φράγματος για το σφάλμα ανάκτησης. Η ιδιότητα ονομάζεται συνθήκη ιδιοτιμών περιορισμένη σε σύνολο, Set-Restricted Eigenvalue Condition (S-REC) , και ορίζεται παρακάτω. Για τον ορισμό αυτό και στο εξής θα συμβολίζουμε με $\|\cdot\|$ την l_2 -νόρμα.

Ορισμός 4.10. Έστω $S \subseteq \mathbb{R}^n$ και πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Λέμε ότι ο A ικανοποιεί την ιδιότητα S-REC (S, γ, δ) αν υπάρχουν $\gamma > 0, \delta \geq 0$ τέτοια ώστε για κάθε $x_i, x_j \in S$ να ισχύει:

$$\|A(x_i - x_j)\| \geq \gamma\|x_i - x_j\| - \delta$$

Με βάση την παραπάνω ιδιότητα μπορεί εύκολα να αποδειχθεί το ακόλουθο θεώρημα που χαρακτηρίζει την αποτελεσματικότητα της μεθόδου 4.1 για επίλυση του compressed sensing , μέσω του άνω φράγματος για το σφάλμα ανάκτησης. Στο θεώρημα υποθέτουμε ένα σύνολο S που αποτελεί το πεδίο αναπαράστασης του γενετικού μοντέλου G και θεωρούμε ότι μπορούμε να επιλύσουμε προσεγγιστικά το πρόβλημα βελτιστοποίησης 4.1 με σφάλμα προσέγγισης $\epsilon > 0$. Δηλαδή, έστω η εκτίμηση \hat{x} που παίρνουμε από την προσεγγιστική βελτιστοποίηση του 4.1, τότε:

$$\|y - A\hat{x}\| \leq \min_{x \in S} \|y - Ax\| + \epsilon \quad (4.3)$$

Ας δούμε τώρα το θεώρημα:

Θεώρημα 4.5. Έστω ότι ο πίνακας μετρήσεων $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ του compressed sensing ικανοποιεί την ιδιότητα S-REC (S, γ, δ) με πιθανότητα $1 - p$ και επιπλέον για κάθε δεδομένο $x \in \mathbb{R}^n$ ισχύει $\|Ax\| \leq 2\|x\|$ με πιθανότητα $1 - p$. Τότε, για εκτίμηση \hat{x} που παίρνουμε από την επίλυση του 4.1, ισχύει:

$$\|x^* - \hat{x}\| \leq \left(\frac{4}{\gamma} - 1\right) \min_{x \in S} \|x^* - x\| + \frac{1}{\gamma}(2\|\eta\| + \delta) + \frac{1}{\gamma}\epsilon$$

, με πιθανότητα $1 - 2p$.

ο πρώτος όρος του φράγματος μοντελοποιεί το σφάλμα αναπαράστασης που είναι εγγενές στη μέθοδο καθώς έχουμε υποθέσει την ύπαρξη γενετικού μοντέλου G με συγκεκριμένες δυνατότητες που αντικατοπτρίζονται στο πεδίο αναπαράστασης S . Επομένως, το

$\tilde{x} = \arg \min_{x \in S} \|x^* - x\|$ είναι η καλύτερη προσέγγιση του άγνωστου σήματος x^* εντός του συνόλου S και συνεπώς αντιστοιχεί στην καλύτερη δυνατή ανάκτηση που μπορούμε να πετύχουμε δεδομένου του μοντέλου G . Ο δεύτερος όρος αφορά το σφάλμα που εισάγεται από την διαδικασία λήψης μετρήσεων του compressed sensing, η οποία αντιστοιχεί στον πίνακα μετρήσεων A και τον προσθετικό θόρυβο η . Τέλος, ο τρίτος όρος του φράγματος εισάγεται από την αδυναμία αποδοτικής βελτιστοποίησης για μη κυρτά προβλήματα που δημιουργεί την ανάγκη προσεγγιστικής βελτιστοποίησης με αποδοτικό τρόπο.

Απόδειξη. Έστω $\tilde{x} = \arg \min_{x \in S} \|x^* - x\|$ η καλύτερη προσέγγιση του άγνωστου σήματος x^* στο S . Παρατηρούμε ότι από την υπόθεση 4.3 και δεδομένου ότι το \tilde{x} είναι feasible για το πρόβλημα βελτιστοποίησης, εφόσον $\tilde{x} \in S$, θα ισχύει ότι:

$$\|y - A\hat{x}\| \leq \|y - A\tilde{x}\| + \epsilon \quad (4.4)$$

Τότε,

$$\begin{aligned} \|\tilde{x} - \hat{x}\| &\leq \frac{1}{\gamma} (\|A(\tilde{x} - \hat{x})\| + \delta) \quad (\text{S-REC } (S, \gamma, \delta)) \\ &\leq \frac{1}{\gamma} (\|A\tilde{x} - y\| + \|A\hat{x} - y\| + \delta) \quad (\text{triangle inequality}) \\ &\leq \frac{1}{\gamma} (2\|A\tilde{x} - y\| + \epsilon + \delta) \quad (4.4) \\ &= \frac{1}{\gamma} (2\|A\tilde{x} - Ax^* + Ax^* - y\| + \epsilon + \delta) \\ &\leq \frac{1}{\gamma} (2\|A(\tilde{x} - x^*)\| + 2\|\eta\| + \epsilon + \delta) \quad (\text{triangle inequality and compressed sensing}). \end{aligned}$$

Η παραπάνω ανισότητα ισχύει με την υπόθεση S-REC (S, γ, δ) για τον πίνακα A , συνεπώς με πιθανότητα $1 - p$. Συγχρόνως, για δεδομένο $x = \tilde{x} - x^*$ ισχύει για τον A ότι $\|Ax\| \leq 2\|x\| \implies \|A(\tilde{x} - x^*)\| \leq 2\|\tilde{x} - x^*\|$, με πιθανότητα $1 - p$.

Συνδυάζοντας τα παραπάνω και εφαρμόζοντας μία απλή τεχνική union bound έχουμε:

$$\begin{aligned} &\mathbb{P} \left[\|\tilde{x} - \hat{x}\| > \frac{1}{\gamma} (4\|\tilde{x} - x^*\| + 2\|\eta\| + \epsilon + \delta) \right] \\ &\leq \mathbb{P} \left[\|\tilde{x} - \hat{x}\| > \frac{1}{\gamma} (2\|A(\tilde{x} - x^*)\| + 2\|\eta\| + \epsilon + \delta) \text{ and } \|A(\tilde{x} - x^*)\| > 2\|\tilde{x} - x^*\| \right] \\ &\leq (1 - (1 - p)) + (1 - (1 - p)) \leq 2p \quad (\text{union bound}) \\ &\implies \mathbb{P} \left[\|\tilde{x} - \hat{x}\| \leq \frac{4}{\gamma} \|\tilde{x} - x^*\| + \frac{1}{\gamma} (2\|\eta\| + \delta) + \frac{1}{\gamma} \epsilon \right] \geq 1 - 2p. \end{aligned}$$

Και χρησιμοποιώντας τριγωνική ανισότητα παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \|\tilde{x} - \hat{x}\| &\leq \|x^* - \hat{x}\| + \|\tilde{x} - x^*\| \leq \frac{4}{\gamma} \|\tilde{x} - x^*\| + \frac{1}{\gamma} (2\|\eta\| + \delta) + \frac{1}{\gamma} \epsilon \\ &\implies \|x^* - \hat{x}\| \leq \left(\frac{4}{\gamma} - 1\right) \min_{x \in S} \|x^* - x\| + \frac{1}{\gamma} (2\|\eta\| + \delta) + \frac{1}{\gamma} \epsilon \end{aligned}$$

, με πιθανότητα $1 - 2p$.

□

4.3.1 Πότε ισχύουν οι συνθήκες για επιτυχή ανάκτηση;

Στην ανάλυση της μεθόδου που παρουσιάστηκε στην εργασία [12], εξετάστηκαν υποθέσεις που εγγυώνται την ικανοποίηση της ιδιότητας S-REC, και κατά συνέπεια μας επιτρέπουν να επιλύσουμε το compressed sensing πετυχαίνοντας επιτυχή ανάκτηση με μεγάλη πιθανότητα. Πιο συγκεκριμένα, αποδεικνύεται το παρακάτω θεώρημα:

Θεώρημα 4.6. (Λήμμα 4.1 [12]) Έστω το γενετικό μοντέλο $G : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$ με την ιδιότητα συνέχειας L -Lipschitz, για κάποιο $L > 0$. Έστω η μπάλα στο \mathbb{R}^k με ακτίνα $r > 0$: $\mathcal{B}^k(r) = \{z \mid z \in \mathbb{R}^k, \|z\| \leq r\}$. Έστω σταθερά $\alpha > 1$, τότε αν:

$$m = \Omega\left(\frac{k}{\alpha^2} \log \frac{Lr}{\delta}\right)$$

, ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με στοιχεία ανεξάρτητα ομοίως κατανομημένα (i.i.d) από την κατανομή $\mathcal{N}(0, 1/m)$ ικανοποιεί την ιδιότητα S-REC $(S, 1 - \alpha, \delta)$, όπου $S = G(\mathcal{B}^k(r))$, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(\alpha^2 m)}$.

Το θεώρημα ισχυρίζεται ότι στο πλαίσιο της μεθόδου 4.1, ένας πίνακας που πραγματοποιεί τυχαίες προβολές, όπως τις ορίσαμε στο κεφάλαιο 2, έχει την ιδιότητα S-REC με μεγάλη πιθανότητα, για αριθμό μετρήσεων m που ικανοποιεί το σχετικό κάτω φράγμα. Το θεώρημα περιέχει δύο επιπλέον υποθέσεις για το γενετικό μοντέλο, ότι λαμβάνει τιμές από μια μπάλα και ότι εμφανίζει κάποιου είδους συνέχεια. Όσον αφορά την πρώτη υπόθεση, θα δούμε ότι αρκεί η είσοδος του γενετικού μοντέλου να ανήκει σε κάποιο συμπαγές υποσύνολο του \mathbb{R}^k . Από την άλλη πλευρά, η υπόθεση συνέχειας L -Lipschitz είναι απαραίτητη όπως θα δούμε στην μελέτη των αντίστοιχων αποδείξεων στην συνέχεια της παραγράφου. Παρακάτω έχουμε τον ορισμό της συνέχειας L -Lipschitz που θα μας χρησιμεύσει, για λόγους πληρότητας.

Ορισμός 4.11. Μία συνάρτηση $f : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$ είναι L -Lipschitz συνεχής, αν υπάρχει σταθερά $L > 0$ τέτοια ώστε:

$$\|f(x) - f(y)\| \leq L\|x - y\|, \forall x, y \in \mathbb{R}^k.$$

Τα γνωστά σε εμάς νευρωνικά δίκτυα με δεδομένα βάρη, τα οποία λειτουργούν ως πραγματικές συναρτήσεις, εμφανίζουν την συνέχεια L -Lipschitz όσο χρησιμοποιούμε συνεχείς ή τμηματικά συνεχείς συναρτήσεις ενεργοποίησης. Η ακριβής εκτίμηση της παραμέτρου L για ένα νευρωνικό δίκτυο είναι δύσκολο πρόβλημα [53]. Ωστόσο, για απλές αρχιτεκτονικές μπορούμε εύκολα να πάρουμε ικανοποιητικά άνω φράγματα.

Αρχικά, ας σκιαγραφήσουμε την στρατηγική της απόδειξης του θεωρήματος 4.6. Σημαντική έννοια που χρησιμοποιείται στην απόδειξη είναι αυτή του καλύμματος ή ϵ -net για ένα συμπαγές σύνολο, όπως είναι η μπάλα στο \mathbb{R}^k . Η έννοια του ϵ -net ορίζεται παρακάτω, για λόγους πληρότητας:

Ορισμός 4.12. (Ορισμός 5.1 [51]) Έστω (X, d) ένας μετρικός χώρος και έστω $\epsilon > 0$. Ένα υποσύνολο \mathcal{M}_ϵ του X καλείται ϵ -net του X αν κάθε σημείο $x \in X$ μπορεί να προσεγγιστεί με ακρίβεια ϵ από σημείο $y \in \mathcal{M}_\epsilon$, δηλαδή έτσι ώστε $d(x, y) \leq \epsilon$. Ο ελαχιστοτικός πληθάνριθμος ενός ϵ -net του X , αν είναι πεπερασμένος, συμβολίζεται ως $\mathcal{M}((X, d), \epsilon)$ και ονομάζεται covering number του X , με παράμετρο ϵ .

Στην δική μας περίπτωση, ο εν λόγω μετρικός χώρος θα είναι η μπάλα $\mathcal{B}^k(r)$ με την ευκλείδεια μετρική. Δηλαδή θα υποθέτουμε ένα ϵ -net, έστω M , για την μπάλα $\mathcal{B}^k(r)$ όπου για κάθε $x \in \mathcal{B}^k(r)$ υπάρχει $y \in M$ τέτοιο ώστε $\|x - y\| \leq \epsilon$. Στο εξής, θα μπορούμε να παραλείψουμε την μετρική καθώς σε αυτό το κεφάλαιο θα μιλάμε πάντοτε για την ευκλείδεια μετρική. Μας ενδιαφέρει ιδιαίτερα ο πληθάρημος του M , ή $|M|$, για λόγους που θα γίνουν ξεκάθαροι στην συνέχεια της παραγράφου. Πιο συγκεκριμένα, ένα βασικό άνω φράγμα που θα χρειαστούμε εκφράζεται παρακάτω:

Σημείωση 2. Για ακτίνα $r > 0$, έστω η μπάλα $\mathcal{B}^k(a, r) = \{z \mid z \in \mathbb{R}^k, \|z - a\| \leq r\}$, με κέντρο $a \in \mathbb{R}^k$. Τότε για κάθε $\epsilon > 0$, έχουμε:

$$\mathcal{M}(\mathcal{B}^k(a, r), \|\cdot\|, \epsilon) \leq \left(1 + \frac{2r}{\epsilon}\right)^k.$$

([52])

Με βάση το σχόλιο 2, μπορούμε να υποθέτουμε την ύπαρξη ενός ϵ -net M για την μπάλα $\mathcal{B}^k(r)$ με πληθάρημο $|M|$ που φράσσεται άνω από την τιμή $(1 + \frac{2r}{\epsilon})^k$, ή κάθε άλλη τιμή μεγαλύτερη από αυτήν.

Η απόδειξη του θεωρήματος 4.6 συνδυάζει τις παρατηρήσεις για τις οποίες συζητήσαμε σε ένα επιχείρημα που εξασφαλίζει ότι για κάθε $x_i = G(z_i), x_j = G(z_j) \in G(\mathcal{B}^k(r))$ θα ισχύει $\|AG(z_i) - AG(z_j)\| \geq (1 - \alpha)\|G(z_i) - G(z_j)\| - \delta$, με μεγάλη πιθανότητα. Τα τρία παρακάτω βήματα συνοψίζουν το επιχείρημα:

1. Η διακριτοποίηση του πεδίου αναπαράστασης $S = G(\mathcal{B}^k(r))$ με χρήση ενός κατάλληλα ορισμένου ϵ -net με φραγμένο πληθάρημο. Αυτό το βήμα μας επιτρέπει να χρησιμοποιήσουμε την προσέγγιση κάθε σημείου του S από κάποιο σημείο του ϵ -net.
2. Η απόδειξη της ανισότητας $\|AG(z_i) - AG(z_j)\| \geq (1 - \alpha)\|G(z_i) - G(z_j)\| - \delta$ για κάθε δεδομένο ζεύγος $G(z_i), G(z_j)$, με αρκετά μεγάλη πιθανότητα. Σε αυτό το βήμα χρησιμοποιούμε επιχειρήματα συγκέντρωσης πιθανότητας για τυχαίους πίνακες. Πιο συγκεκριμένα, θα μας είναι χρήσιμο το *Θεώρημα Τυχαίων Προβολών* του κεφαλαίου 2 καθώς και το λήμμα 4.2 που διατυπώνεται παρακάτω.
3. Τέλος, η σύνθεση των δύο πρώτων βημάτων με μία τεχνική union bound πάνω στα σημεία του κατάλληλου διακριτοποιημένου συνόλου (π.χ. ϵ -net). Με αυτό το βήμα εξασφαλίζεται η ισχύς της ανισότητας-στόχου για κάθε ζεύγος $G(z_i), G(z_j)$, με μεγάλη πιθανότητα.

Παρακάτω, διατυπώνεται το λήμμα 4.2 του οποίου η τεχνική απόδειξης θα συζητηθεί στην επόμενη παράγραφο.

Λήμμα 4.2. (Λήμμα 8.2 [12]) Έστω το γενετικό μοντέλο $G : \mathbb{R}^k \rightarrow \mathbb{R}^n$ με την ιδιότητα συνέχειας L -Lipschitz, για κάποιο $L > 0$. Έστω η μπάλα στο \mathbb{R}^k με ακτίνα $r > 0$: $\mathcal{B}^k(r) = \{z \mid z \in \mathbb{R}^k, \|z\| \leq r\}$ και το πεδίο αναπαράστασης του γενετικού μοντέλου $S = G(\mathcal{B}^k(r))$. Αν:

$$m = \Omega\left(k \log \frac{Lr}{\delta}\right)$$

, τότε για τον πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ με στοιχεία ανεξάρτητα ομοίως καταναμεημένα (i.i.d) από την κατανομή $\mathcal{N}(0, 1/m)$ ισχύει για κάθε $x \in S$:

$$\|x - x'\| = \mathcal{O}(\delta), \quad x' \in S \implies \|A(x - x')\| = \mathcal{O}(\delta)$$

, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(m)}$.

Σε αυτό το σημείο είμαστε έτοιμοι να προχωρήσουμε στην απόδειξη του θεωρήματος 4.6 με αυστηρούς όρους.

Απόδειξη. (Θεωρήματος 4.6)

Στην απόδειξη θα ακολουθήσουμε τα βήματα της σκιαγράφησης.

1. Πρώτο βήμα:

Με βάση το σχόλιο 2 και εφόσον $(1 + \frac{2r}{\epsilon})^k \leq (\frac{4r}{\epsilon})^k$ μπορούμε να υποθέσουμε ότι υπάρχει ένα $\frac{\delta}{L}$ -net για την μπάλα $\mathcal{B}^k(r)$, έστω N , τέτοιο ώστε:

$$|N| \leq \left(\frac{4rL}{\delta}\right)^k \implies \log |N| \leq k \log \left(\frac{4rL}{\delta}\right).$$

Λόγω της ιδιότητας συνέχειας L -Lipschitz για το μοντέλο $G(\cdot)$, το $G(N)$ θα είναι ένα δ -net του $S = G(\mathcal{B}^k(r))$, καθώς:

$$\forall z_i, z_j \in \mathcal{B}^k(r), \|z_i - z_j\| \leq \frac{\delta}{L} \implies \|G(z_i) - G(z_j)\| \leq L\|z_i - z_j\| \leq \delta.$$

Τώρα εφόσον η ιδιότητα S-REC $(S, 1 - \alpha, \delta)$ που θέλουμε να αποδείξουμε αφορά διαφορές ανάμεσα σε ζεύγη $x_i = G(z_i), x_j = G(z_j) \in S$ θα είναι χρήσιμο να χρησιμοποιήσουμε την διακριτοποίηση που μας προσφέρει το $G(N)$ ώστε να διακριτοποιήσουμε το σύνολο των διαφορών ορίζοντας το παρακάτω σύνολο:

$$T = \{G(z_i) - G(z_j) \mid z_i, z_j \in N\}$$

, για το οποίο ισχύει:

$$|T| \leq |N|^2 \implies \log |T| \leq 2 \log |N| \leq 2k \log \left(\frac{4rL}{\delta}\right).$$

Σε αυτό το βήμα χρησιμοποιήσαμε την ιδιότητα L -Lipschitz η οποία είναι απαραίτητη καθώς μας επιτρέπει να συλλογιστούμε για την διακριτοποίηση του πεδίου αναπαράστασης S .

2. Δεύτερο βήμα:

Εδώ, θα προσπαθήσουμε να αποδείξουμε την ανισότητα $\|AG(z) - AG(z')\| \geq (1 - \alpha)\|G(z) - G(z')\| - \delta$ για δεδομένο ζεύγος $G(z), G(z')$, με μεγάλη πιθανότητα.

Αρχικά, έστω το ζεύγος $z, z' \in \mathcal{B}^k(r)$. Τότε από το πρώτο βήμα ξέρουμε ότι $\exists z_1, z_2 \in N$ τέτοια ώστε $G(z_1), G(z_2) \in G(N)$, και συνεπώς $\|G(z) - G(z_1)\| \leq \delta$ και $\|G(z') - G(z_2)\| \leq \delta$.

Επομένως, χρησιμοποιώντας την τριγωνική ανισότητα παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \|G(z) - G(z')\| &\leq \|G(z) - G(z_1)\| + \|G(z_1) - G(z_2)\| + \|G(z_2) - G(z')\| \\ &\leq \|G(z_1) - G(z_2)\| + 2\delta \implies \\ \|G(z) - G(z')\| &\leq \|G(z_1) - G(z_2)\| + \mathcal{O}(\delta) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Συνεχίζοντας, για να αποδείξουμε την ανισότητα-στόχο, πρέπει να συνδέσουμε την τιμή $\|G(z) - G(z')\|$ με την τιμή $\|AG(z) - AG(z')\|$ μέσω της διακριτοποίησης που προσφέρει το δ -net $G(N)$. Για να το πετύχουμε αυτό θα χρησιμοποιήσουμε το λήμμα 4.2, υποθέτοντας ότι $m = \Omega(\frac{k}{\alpha^2} \log \frac{Lr}{\delta}) = \Omega(k \log \frac{Lr}{\delta})$. Ισχύει επομένως το ακόλουθο: Εφόσον, $\|G(z) - G(z_1)\| = \mathcal{O}(\delta)$ και $\|G(z') - G(z_2)\| = \mathcal{O}(\delta)$, τότε $\|AG(z) - AG(z_1)\| = \mathcal{O}(\delta)$ και $\|AG(z') - AG(z_2)\| = \mathcal{O}(\delta)$, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(m)}$. Για την ακρίβεια, το θεώρημα 4.2 μας δίνει το παραπάνω συμπέρασμα για κάθε $G(z), G(z') \in S$ με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(m)}$, και όχι για δεδομένο ζεύγος $G(z), G(z')$ και αντίστοιχα $G(z_1), G(z_2)$.

Και πάλι, χρησιμοποιώντας την τριγωνική ανισότητα παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \|AG(z_1) - AG(z_2)\| &\leq \|AG(z_1) - AG(z)\| + \|AG(z) - AG(z')\| + \|AG(z') - AG(z_2)\| \\ &\leq \|AG(z) - AG(z')\| + \mathcal{O}(\delta) \implies \\ \|AG(z_1) - AG(z_2)\| &\leq \|AG(z) - AG(z')\| + \mathcal{O}(\delta) \end{aligned} \quad (4.6)$$

, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(m)}$.

Τέλος, από το *Θεώρημα Τυχαίων Προβολών* του κεφαλαίου 2 έχουμε για τον πίνακα A , όπως ορίζεται από το θεώρημα, ότι για δεδομένο διάνυσμα $x \in \mathbb{R}^n$, υπάρχει σταθερά $c > 0$ τέτοια ώστε για για $\alpha \in (0, 1)$,

$$\begin{aligned} \mathbb{P}[\|Ax\| \leq (1 - \alpha)\|x\| \text{ or } \|Ax\| \geq (1 + \alpha)\|x\|] &\leq 3e^{-c\alpha^2 m} \\ \implies \mathbb{P}[\|Ax\| \leq (1 - \alpha)\|x\|] &\leq e^{-\Omega(\alpha^2 m)}. \end{aligned}$$

Εφαρμόζοντας το παραπάνω για το δεδομένο διάνυσμα $G(z_1) - G(z_2) \in T$ έχουμε:

$$\|AG(z_1) - AG(z_2)\| \geq (1 - \alpha)\|G(z_1) - G(z_2)\| \quad (4.7)$$

, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(\alpha^2 m)}$.

Συνδυάζοντας τις εξισώσεις 4.5, 4.6 και 4.7 παίρνουμε την ανισότητα-στόχο για δεδομένο ζεύγος $G(z), G(z')$, με μεγάλη πιθανότητα. Υπογραμμίζουμε ότι ως εδώ ξέρουμε ότι ισχύει η ανισότητα-στόχος, με μεγάλη πιθανότητα, για ένα δεδομένο ζεύγος $G(z), G(z')$ καθώς με βάση το ζεύγος αυτό επιλέγουμε ένα $G(z_1) - G(z_2) \in T$ για το οποίο ισχύει η εξίσωση 4.7.

3. Τρίτο βήμα:

Για να αποδείξουμε την ανισότητα για κάθε ζεύγος $G(z), G(z')$ πρέπει να υπολογίσουμε την πιθανότητα η εξίσωση 4.7 να ισχύει για κάθε διάνυσμα του T , το οποίο θα πετύχουμε εφαρμόζοντας το union bound . Έτσι, παίρνουμε:

$$\mathbb{P}[\|At\| \geq (1 - \alpha)\|t\|, \forall t \in T] \geq 1 - |T|e^{-\Omega(\alpha^2 m)} = 1 - e^{e \log |T| - \Omega(\alpha^2 m)}.$$

Για τις παραμέτρους m και $\log |T|$ υποθέτουμε $m = \Omega(\frac{k}{\alpha^2} \log \frac{Lr}{\delta})$ και $\log |T| \leq 2k \log(\frac{4rL}{\delta})$. Επομένως, με κατάλληλη επιλογή του m , δηλαδή των αντίστοιχων πολλαπλασιαστικών σταθερών, θα ισχύει $\log |T| - \Omega(\alpha^2 m) = -\Omega(\alpha^2 m)$, και συνεπώς:

$$\|AG(z_1) - AG(z_2)\| \geq (1 - \alpha)\|G(z_1) - G(z_2)\|, \forall G(z_1) - G(z_2) \in T \quad (4.8)$$

, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(\alpha^2 m)}$.

Τέλος, έχουμε:

$$(1 - \alpha)\|G(z) - G(z')\| \leq (1 - \alpha)\|G(z_1) - G(z_2)\| + \mathcal{O}(\delta) \quad (4.5)$$

$$\leq \|AG(z_1) - AG(z_2)\| + \mathcal{O}(\delta) \quad (4.8)$$

$$\leq \|AG(z) - AG(z')\| + \mathcal{O}(\delta) \quad (4.6)$$

$$\implies \|AG(z) - AG(z')\| \geq (1 - \alpha)\|G(z) - G(z')\| - \mathcal{O}(\delta) \quad (4.9)$$

, με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(\alpha^2 m)}$.

□

Από της ιδιότητες τυχαίων πινάκων στο λήμμα 4.2.

Σε αυτή την παράγραφο θα δούμε το πιο τεχνικό μέρος της μελέτης της μεθόδου 4.1. Αυτό συνοψίζεται στην απόδειξη του λήμματος 4.2, το οποίο κληροδοτεί τις υποθέσεις του για τον πίνακα μετρήσεων A , τον αριθμό μετρήσεων m καθώς και το γενετικό μοντέλο $G(\cdot)$ στο θεώρημα 4.6. Στην απόδειξη αυτή θα χρησιμοποιήσουμε μία βασική τεχνική chaining , που μας επιτρέπει να φράσουμε πιθανότητες αποτελεσματικά. Αν θέλει κανείς να εμβαθύνει στην τεχνική, αυτή αναλύεται στο σύγγραμμα [52]. Εν συντομία, ας δούμε τα βασικά σημεία της απόδειξης με βάση την τεχνική chaining και την διαίσθηση πίσω από αυτά:

1. Δημιουργούμε την αλυσίδα: Αρχίζοντας από έναν μετρικό χώρο, στην περίπτωση μας το πεδίο αναπαράστασης S με την ευκλείδια μετρική, κατασκευάζουμε μία διακριτοποίηση που αποτελείται από μία αλυσίδα nets , έστω $\{N_i\}_{i=0}^l$ με παράμετρο ακρίβειας δ_i . Η αλυσίδα αρχίζει από το net που προσφέρει την λιγότερο ακριβή διακριτοποίηση και τελειώνει στο πιο ακριβές net , με κάθε επόμενο net να είναι υπερσύνολο του προηγούμενου. Μάλιστα, υιοθετούμε μία δυαδική πολλαπλασιαστική κλίμακα 2^{-i} με την αυξάνεται η ακρίβεια των διακριτοποιήσεων, δηλαδή $\delta_i = \delta \cdot 2^{-i}$, με δ την παράμετρο του

net με μικρότερη ακρίβεια. Με δεδομένη της παραπάνω κατασκευή, κάθε $x \in S$ μπορεί να εκφραστεί ως τηλεσκοπικό άθροισμα

$$x = x_0 + (x_1 - x_0) + (x_2 - x_1) + \cdots + (x_l - x_{l-1}) + x^f \implies x - x_0 = \sum_{i=0}^{l-1} (x_{i+1} - x_i) + x^f$$

, με $x^f = x - x_l$, όπου κάθε x_i είναι η καλύτερη προσέγγιση του x στο N_i . Με άλλα λόγια, η αλυσίδα των $\{x_i\}_{i=0}^l$ αποτελείται από προοδευτικά ακριβέστερες προσεγγίσεις του x . Εφόσον, εκ κατασκευής ισχύει $\|x - x_0\| \leq \delta_0 = \delta$, υποθέτουμε $x' \equiv x_0$, χωρίς βλάβη της γενικότητας, και συνεπώς $\|x - x_0\| = \|x - x'\| = \mathcal{O}(\delta)$. Επομένως, στόχος μας είναι να φράξουμε την ποσότητα $\|A(x - x_0)\|$. Χρησιμοποιώντας τις παραπάνω εκφράσεις και την τριγωνική ανισότητα έχουμε:

$$\|A(x - x_0)\| = \left\| \sum_{i=0}^{l-1} A(x_{i+1} - x_i) + Ax^f \right\| \leq \sum_{i=0}^{l-1} \|A(x_{i+1} - x_i)\| + \|Ax^f\|.$$

2. Φράσσουμε του επιμέρους όρους: Σε αυτό το σημείο θα χρησιμοποιήσουμε το *Θεώρημα Τυχαίων Προβολών* του κεφαλαίου 2 ώστε να φράξουμε τις ποσότητες $\|A(x_{i+1} - x_i)\|$, με μεγάλη πιθανότητα. Θα δούμε στην συνέχεια της τεχνικές λεπτομέρειες του βήματος αυτού. Ωστόσο, είναι σημαντικό να προσέξουμε εδώ ότι το φράγμα που μας δίνει το θεώρημα άμεσα ισχύει για δεδομένο διάνυσμα $x_{i+1} - x_i$. Επομένως πρέπει να μετρήσουμε, για κάθε i , πόσα είναι τα πιθανά διανύσματα $x_{i+1} - x_i$, ώστε στην συνέχεια να μπορούμε να εφαρμόσουμε την γνωστή μας πια τεχνική union bound. Παρατηρούμε ότι εκ κατασκευής ισχύει $x_{i+1} \in N_{i+1}$ και $x_i \in N_i$, επομένως συνδυαστικά παίρνουμε ότι το πλήθος των διανυσμάτων $x_{i+1} - x_i$ για δεδομένο i θα είναι $\leq |N_{i+1}| |N_i|$.
3. Αθροίζουμε τους όρους: Καταλήγοντας, χρησιμοποιούμε union bound, για κάθε διάνυσμα $x_{i+1} - x_i$ για δεδομένο i καθώς και για κάθε i , ώστε να πετύχουμε ένα φράγμα για το άθροισμα των επιμέρους όρων, με μεγάλη πιθανότητα.

Ολοκληρώνοντας την παράγραφο, ας δούμε την απόδειξη του λήμματος 4.2 με τεχνική λεπτομέρεια.

Απόδειξη. (Λήμματος 4.2)

Όμοια με την στρατηγική που ακολουθήσαμε στην απόδειξη του 4.6, θα αρχίσουμε με μία διακριτοποίηση του χώρου $(\mathcal{B}^k(r), \|\cdot\|)$, δηλαδή του πεδίου κωδικοποίησης του γενετικού μοντέλου $G(\cdot)$, η οποία θα αντιστοιχεί σε μία διακριτοποίηση του πεδίου αναπαράστασης $S = G(\mathcal{B}^k(r))$, λόγω της ιδιότητας συνέχειας L -Lipschitz. Ωστόσο, σε αυτή την περίπτωση η διακριτοποίηση δεν θα αποτελείται από ένα net αλλά από μία αλυσίδα τέτοιων με διαφορετικό επίπεδο ακρίβειας. Πιο συγκεκριμένα, έστω:

$$M = M_0 \subseteq M_1 \cdots \subseteq M_l$$

, μία αλυσίδα όπου κάθε M_i είναι ένα $\frac{\delta_i}{L}$ -net του $\mathcal{B}^k(r)$ με $\delta_i = \delta/2^i$. Όπως έχουμε δείξει και παραπάνω, λόγω της ιδιότητας συνέχειας L -Lipschitz κάθε $\frac{\delta_i}{L}$ -net M_i αντιστοιχεί σε ένα

δ_i -net του $S = G(\mathcal{B}^k(r))$, έστω $N_i = G(M_i)$, με $|M_i| = |N_i|$ και επομένως έχουμε την αλυσίδα:

$$N = N_0 \subseteq N_1 \cdots \subseteq N_l.$$

Από το σχόλιο 2 μπορούμε και πάλι να υποθέσουμε κατάλληλο άνω φράγμα για τον πληθάρημο κάθε M_i και συνεπώς κάθε N_i :

$$|N_i| \leq \left(\frac{4rL}{\delta_i}\right)^k \implies \log |N_i| \leq k \log \left(\frac{4rL}{\delta_i}\right) = k \log \left(\frac{4rL}{\delta/2^i}\right) = ik + k \log \left(\frac{4rL}{\delta}\right).$$

Όπως είδαμε και παραπάνω, η κατασκευή αυτή μας προσφέρει την δυνατότητα να εκφράσουμε κάθε $x \in S$ ως τηλεσκοπικό άθροισμα, και να πάρουμε την έκφραση:

$$x - x_0 = \sum_{i=0}^{l-1} (x_{i+1} - x_i) + x^f$$

, όπου $x_i \in N_i$, $x^f = x - x_l$, $\|x - x_i\| \leq \delta_i$ και $\|x - x_0\| = \mathcal{O}(\delta)$. Ο στόχος μας είναι για κάθε $x \in S$ να φράξουμε την ποσότητα $\|A(x - x_0)\|$, δεδομένου ότι $\|x - x_0\| = \mathcal{O}(\delta)$.

Κατά συνέπεια, θα χρησιμοποιήσουμε τα παραπάνω ως αφετηρία και με απλές πράξεις θα καταλήξουμε στην παρακάτω έκφραση:

$$\|A(x - x_0)\| \leq \sum_{i=0}^{l-1} \|A(x_{i+1} - x_i)\| + \|Ax^f\|. \quad (4.10)$$

Τώρα αρκεί να πάρουμε κατάλληλο φράγμα για κάθε $\|A(x_{i+1} - x_i)\|$ με αρκετά μεγάλη πιθανότητα, καθώς και για την τιμή $\|Ax^f\|$. Θα εστιάσουμε αρχικά στο πρώτο μέρος.

Εφόσον, οι διαφορές στοιχείων διαδοχικών nets εμφανίζεται στην παραπάνω έκφραση που θα χρησιμοποιήσουμε στην συνέχεια είναι χρήσιμο να ορίσουμε την εξής οικογένεια συνόλων:

$$T_i = \{x_{i+1} - x_i \mid x_{i+1} \in N_{i+1}, x_i \in N_i\}$$

, για κάθε $i \in \{0, 1, \dots, l_1\}$. Και για τον πληθάρημο κάθε T_i γνωρίζουμε ότι:

$$\begin{aligned} |T_i| &\leq |N_{i+1}| |N_i| \implies \log |T_i| \leq \log |N_{i+1}| + \log |N_i| \\ &\leq (2i+1)k + 2k \log \left(\frac{4rL}{\delta}\right) \leq 3ik + 2k \log \left(\frac{4rL}{\delta}\right). \end{aligned}$$

Και γι αυτή την απόδειξη προκειμένου να πάρουμε άνω φράγματα για τις ποσότητες $\|A(x_{i+1} - x_i)\|$ θα χρειαστούμε το *Θεώρημα Τυχαίων Προβολών* του κεφαλαίου 2, το οποίο θα ισχύει για τον πίνακα A , όπως ορίζεται από το λήμμα. Έχουμε, λοιπόν, το ακόλουθο:

$$\mathbb{P}[\|At\| \geq (1 + \epsilon_i)\|t\|] \leq e^{-\Omega(\epsilon_i^2 m)}, \quad \forall i \in \{0, 1, \dots, l_1\}, \forall t \in T_i.$$

Επιλέγουμε $\epsilon_i = \mathcal{O}(1) + \left(\frac{ik}{m}\right)^{1/2}$ και θέτουμε την τιμή του l έτσι ώστε να ισχύει πάντοτε $0 < \epsilon_i < 1$.

Με βάση το παραπάνω και εφαρμόζοντας το union bound παίρνουμε:

$$\mathbb{P}[\|At\| \leq (1 + \epsilon_i)\|t\|, \forall i, \forall t \in T_i] \geq 1 - \sum_{i=0}^{l-1} |T_i| e^{-\Omega(\epsilon_i^2 m)} = 1 - \sum_{i=0}^{l-1} e^{c \log |T_i| - c_1 \epsilon_i^2 m}.$$

Έστω $p_i = c \log |T_i| - c_1 \epsilon_i^2 m$. Το c_1 είναι σταθερά τέτοια ώστε να ισχύει το *Θεώρημα Τυχαίων Προβολών*. Γνωρίζουμε ότι $\log |T_i| \leq 3ik + 2k \log \left(\frac{4rL}{\delta}\right)$ οπότε μπορούμε να επιλέξουμε $\log |T_i| = \Theta(ik + m)$, με κατάλληλη πολλαπλασιαστική σταθερά. Επομένως, θα ισχύει $p_i = c_2(ik + m) - c_1 \epsilon_i^2 m$, για κάποιο $c_2 > 0$. Συνεπώς, για αρκετά μικρό c_2 και κατάλληλη επιλογή του ϵ_i παίρνουμε ότι $p_i \leq -c'm - c''ik$, για κάποια $c', c'' > 0$. Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{P} [\|At\| \leq (1 + \epsilon_i)\|t\|, \forall i, \forall t \in T_i] &\geq 1 - \sum_{i=0}^{l-1} e^{p_i} = 1 - \sum_{i=0}^{l-1} e^{-\Omega(m)} e^{-c''ik} \\ &= 1 - e^{-\Omega(m)} \sum_{i=0}^{l-1} e^{-c''ik} = 1 - e^{-\Omega(m)} \mathcal{O}(1) \implies \\ \mathbb{P} [\|At\| \leq (1 + \epsilon_i)\|t\|, \forall i, \forall t \in T_i] &\geq 1 - e^{-\Omega(m)}. \end{aligned} \quad (4.11)$$

Και με βάση την 4.11 έχουμε με πιθανότητα $1 - e^{-\Omega(m)}$:

$$\begin{aligned} \sum_{i=0}^{l-1} \|A(x_{i+1} - x_i)\| &\leq \sum_{i=0}^{l-1} (1 + \epsilon_i) \|x_{i+1} - x_i\| \\ &\leq \sum_{i=0}^{l-1} (1 + \epsilon_i) 2\delta_i \quad (x_{i+1} \in N_{i+1}, x_i \in N_i) \\ &= \delta \sum_{i=0}^{l-1} \frac{1}{2^{i-1}} \left(\mathcal{O}(1) + \left(\frac{ik}{m}\right)^{1/2} \right) = \delta \mathcal{O}(1) = \mathcal{O}(\delta) \end{aligned}$$

Τέλος, προκειμένου να πάρουμε από την εξίσωση 4.10 το επιθυμητό φράγμα πρέπει να εξετάσουμε τον όρο $\|Ax^f\|$.

Αρχικά, γνωρίζουμε ότι $\|Ax^f\| \leq \|A\| \|x^f\|$. Από ιδιότητες των τυχαίων πινάκων έχουμε το άνω φράγμα $\|A\| \leq 2 + \sqrt{n/m}$, με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - 2e^{-m/2}$ (από το Corollary 5.35 του [51]). Επιπλέον, για το $\|x^f\|$ ισχύει το ακόλουθο: $\|x^f\| = \|x - x_l\| \leq \delta_l = \delta/2^l$. Συνεπώς, $\|Ax^f\| \leq (2 + \sqrt{n/m})\delta/2^l = \mathcal{O}(\delta)$.

Συνδυάζοντας τα παραπάνω, από την εξίσωση 4.10 παίρνουμε:

$$\|A(x - x_0)\| \leq \mathcal{O}(\delta)$$

, με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - e^{-\Omega(m)}$. □

Θα αναρωτηθεί κανείς, ποιός είναι ο σκοπός της χρήσης της αλυσίδας και γιατί αυτή είναι απαραίτητη. Πράγματι, η χρησιμότητα δεν είναι προφανής και για να την αντιληφθούμε πρέπει να εξετάσουμε με προσοχή τον τρόπο με τον οποίο εξάγουμε τις τιμές της πιθανότητας και του άνω φράγματος που πετυχαίνει η απόδειξη. Πιο συγκεκριμένα, η διακριτοποίηση με την αλυσίδα μας επιτρέπει να προσεγγίζουμε κάθε $x \in S$ με αυθαίρετη ακρίβεια (που καθορίζεται από την παράμετρο l) χωρίς αυτό να μας κοστίζει στον υπολογισμό της πιθανότητας με την οποία ισχύει το επιθυμητό φράγμα του λήμματος. Το πιο σημαντικό σημείο είναι ότι το πλήθος

που συμπεριλαμβάνουμε για τον υπολογισμό του union bound , το οποίο καθορίζει και την προαναφερθείσα πιθανότητα, δεν προκύπτει από το συνολικό πλήθος των στοιχείων της διακριτοποίησης αλλά από του πληθαιθμούς δύο διαδοχικών nets της αλυσίδας. Με άλλα λόγια, στο σημείο υπολογισμού της πιθανότητας για την εξίσωση 4.11 όπου χρησιμοποιούμε union bound αθροίζουμε N_i τα πλήθη των ζευγών που προκύπτουν από διαδοχικά nets της αλυσίδας. Με αυτόν τον τρόπο η πιθανότητα ισχύος της 4.11 διατηρείται αρκετά μεγάλη ενώ συγχρόνως η αλυσίδα μας επιτρέπει να προσεγγίσουμε κάθε x με ακρίβεια $\|x^f\|$. Καταλήγοντας, για κάθε x του συνόλου S με μη-μετρήσιμο πληθαιθμο, καταφέρνουμε να έχουμε το επιθυμητό άνω φράγμα, ενώ συγχρόνως πετυχαίνουμε να ισχύει αυτό με μεγάλη πιθανότητα.

Κεφάλαιο 5

Πειραματικό Μέρος: Εφαρμογή των Μεθόδων σε Αστρονομικά Δεδομένα

5.1 Εισαγωγή

Σε αυτό το κεφάλαιο, θα δούμε την εφαρμογή των μεθόδων του προηγούμενου κεφαλαίου σε πραγματικά προβλήματα με αστρονομικά δεδομένα, τα οποία αποτέλεσαν κίνητρο για την εκπόνηση της παρούσας εργασίας. Θα παρουσιάσουμε αναλυτικά τα δεδομένα τα οποία μας αφορούν καθώς και τα πραγματικά αντίστροφα προβλήματα που προκύπτουν σε αυτά, τον πειραματικό μας σχεδιασμό και τα αποτελέσματά μας.

5.2 Δεδομένα και Προβλήματα Ενδιαφέροντος

Η μέθοδοι που εξετάσαμε στο προηγούμενο κεφάλαιο έχουν αξιολογηθεί πειραματικά εκτενώς για την επίλυση του compressed sensing με σήματα εικόνων ή τεχνητά σήματα, καθώς και για ρεαλιστικά αντίστροφα προβλήματα που αφορούν σήματα εικόνων τα οποία έχουν υποστεί κάποιου είδους αλλοίωση. Μερικά από αυτά τα προβλήματα είναι η συμπλήρωση ενός μέρους της εικόνας που λείπει (inpainting), η αύξηση της ανάλυσης της εικόνας (super-resolution) και ο καθαρισμός της εικόνας από προσθετικό θόρυβο μικρής ενέργειας (denoising).

Σε αυτή την εργασία επιχειρούμε να εφαρμόσουμε κάποιες από τις τεχνικές του προηγούμενου κεφαλαίου σε διαφορετικά πραγματικά σήματα μίας διάστασης. Πιο συγκεκριμένα, χρησιμοποιούμε την μέθοδο που παρουσιάζεται στην εργασία [12] καθώς και στο προηγούμενο κεφάλαιο, η οποία περιλαμβάνει την εκπαίδευση ενός γενετικού μοντέλου με τεχνικές μηχανικής μάθησης (και πιο συγκεκριμένα με χρήση νευρωνικών δικτύων) και στην συνέχεια την χρήση του γενετικού μοντέλου για την επίλυση (πρακτικών) αντίστροφων προβλημάτων όπως αυτά που περιγράψαμε παραπάνω για σήματα εικόνων. Η μέθοδος βασίζεται στην αποτελεσματικότητά της στην ικανότητα ενός γενετικού μοντέλου να αναπαριστά επιτυχώς μία οικογένεια σημάτων και να «διορθώνει» ένα ατελές σήμα ώστε να μπορεί να θεωρηθεί μέλος της οικο-

γένειας. Στην περίπτωση μας, ενδιαφερόμαστε για αστρονομικά δεδομένα που ονομάζονται Spectral Energy Distributions (SEDs) και παρουσιάζονται ως γραφήματα της ενέργειας που εκπέμπεται από ένα ουράνιο σώμα συναρτήσει διαφορετικών μηκών κύματος. Τέτοιου είδους σήματα συλλέγονται με μετρήσεις σε συγκεκριμένα εύρη μηκών κύματος από συγκεκριμένα όργανα και με διαφορετικές τεχνικές, ενώ όσο περισσότερες και ακριβέστερες μετρήσεις συλλεχθούν για ένα αντικείμενο τόσο πιο ακριβής είναι και η κατανομή SED που κατασκευάζεται για αυτό. Αυτά τα δεδομένα χρησιμοποιούνται για την κατανόηση των ουράνιων σωμάτων και την κατηγοριοποίησή τους με βάση τα αντίστοιχα χαρακτηριστικά (features). Ωστόσο, οι μετρήσεις αυτές συχνά είναι ελλιπείς ή/και θορυβώδεις για αυτό και έχουν αναπτυχθεί υπολογιστικές μέθοδοι για την επεξεργασία τους. Κάποιες από αυτές περιγράφονται στην ανάλυση [56]. Σε αυτή την περίπτωση, εμείς θέλουμε να εφαρμόσουμε σύγχρονες τεχνικές μηχανικής μάθησης για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων σε αυτά τα δεδομένα ώστε να ελέγξουμε αν αυτές θα μπορούσαν να είναι μία πιο αποτελεσματική προσέγγιση στην επεξεργασία των ατελών μετρήσεων. Πιο συγκεκριμένα, θα μπορούσαμε να μειώσουμε μακροπρόθεσμα το (υπολογιστικό) κόστος της επεξεργασίας αυτών των ατελών μετρήσεων καθώς και να πετύχουμε μεγαλύτερη ακρίβεια στο τελικό αποτέλεσμα, δεδομένου ότι η γνώση που λαμβάνει ένα σύστημα μηχανικής μάθησης από μεγάλο όγκο δεδομένων κατά την επιτυχή εκπαίδευσή του μπορεί να γενικευτεί με αποτελεσματικό τρόπο. Επιπλέον, θα θέλαμε μία τέτοια μέθοδος να μπορεί να είναι αποτελεσματική με σημαντικά ελλιπείς μετρήσεις, λόγω της ιδιότητας γενίκευσης ενός συστήματος μηχανικής μάθησης, κάτι που θα ήταν ιδιαίτερα σημαντικό για την μείωση του κόστους λήψης των μετρήσεων σε ρεαλιστικές συνθήκες.

Προκειμένου να εξετάσουμε εάν η προσέγγισή μας είναι χρήσιμη επιλέξαμε να χρησιμοποιήσουμε ένα σύνολο δεδομένων που παρέχεται μέσω ενός εξειδικευμένου Python module που ονομάζεται astroML¹ και περιέχει δεδομένα και λογισμικό για την επίλυση προβλημάτων της αστροφυσικής και αστρονομίας με τεχνικές μηχανικής μάθησης και εξόρυξης δεδομένων. Το συνολικό έργο παρουσιάζεται στο σύγγραμμα [49]. Για τις δικές μας ανάγκες χρησιμοποιήσαμε το σύνολο δεδομένων SDSS Corrected Spectra που αποτελεί ένα σύνολο φασμάτων από 4000 γαλαξίες. Τα φάσματα έχουν υποστεί επεξεργασία με iterative PCA ([56]) και έπειτα έχουν ψηφιοποιηθεί σε μετρήσεις που αντιστοιχούν σε 1000 μήκη κύματος στο εύρος των 3000-8000 Angstrom. Η προεπεξεργασία έχει πραγματοποιηθεί ώστε τα σήματα να είναι πλήρη και ακριβή σε επαρκή βαθμό, διότι όπως συμβαίνει συχνά με τέτοιου είδους σήματα, αρχικά παρουσίαζαν ανωμαλίες και ελλείψεις που σχετίζονται με τεχνικά προβλήματα στην λήψη των μετρήσεων, παρεμβολές ή άλλα φαινόμενα. Να σημειώσουμε εδώ ότι για τις ανάγκες τις μεθόδου που εξετάζουμε πρέπει να συλλεχθεί ένα επαρκώς μεγάλο, πλήρες και ακριβές σύνολο δεδομένων ώστε να γίνει η εκπαίδευση του γενετικού μοντέλου. Στην συνέχεια, το γενετικό μοντέλο μπορεί να γενικεύσει την γνώση και να μας επιτρέψει να διορθώσουμε ή να συμπληρώσουμε μετρήσεις που λαμβάνουμε από νέα ουράνια αντικείμενα, φυσικά στο εύρος των μηκών κύματος στο οποίο εξ αρχής εκπαιδεύσαμε το γενετικό μοντέλο.

Σε αυτό το σημείο να σχολιάσουμε ότι ακόμα και μετά την προεπεξεργασία στο σύνολο δεδομένων SDSS Corrected Spectra, εμφανίζονται ακραίες και προβληματικές τιμές (outliers)

¹<http://www.astroML.org>

) , γεγονός που πιθανώς οφείλεται στην αναποτελεσματικότητα των υπάρχοντων τεχνικών προεπεξεργασίας (π.χ. iterative PCA) . Αυτό φυσικά δυσχεραίνει την αποδοτική εκπαίδευση ενός γενετικού μοντέλου και κατα συνέπεια επηρεάζει την αποτελεσματικότητα της μεθόδου μας, ενώ δεν είμαστε ακόμα σε θέση να προσδιορίσουμε σε τι βαθμό συμβαίνει αυτό. Ωστόσο, από την άλλη πλευρά αυτό δείχνει ότι η ανάγκη εύρεσης πιο σύγχρονων μεθόδων για την επίλυση αυτών των προβλημάτων είναι επιτακτική.

5.3 Σχεδιασμός Πειραμάτων

5.3.1 Κατασκευή Γενετικών Μοντέλων

Για την κατασκευή γενετικών μοντέλων επιλέξαμε να εστιάσουμε στα Generative Adversarial Networks (GANs) και στην μέθοδο Generative Latent Optimization (GLO) . Για τις δύο μεθόδους επιλέξαμε να χρησιμοποιήσουμε την ίδια αρχιτεκτονική για τον Generator : Ένα Feedforward νευρωνικό δίκτυο 7 κρυφών επιπέδων με leakyReLU συνάρτηση ενεργοποίησης (σε όλα τα επίπεδα εκτός από το επίπεδο εξόδου). Επιπλέον, για την επιτάχυνση της εκπαίδευσης χρησιμοποιήσαμε Batch Normalization μίας διάστασης, μία τεχνική κανονικοποίησης της εξόδου κάθε κρυφού επιπέδου [29]. Συνολικά το γενετικό μοντέλο έχει $\approx 6M$ εκπαιδύσιμες παραμέτρους. Για τον Discriminator στην περίπτωση των GANs χρησιμοποιήθηκε το συμμετρικό νευρωνικό δίκτυο του Generator .

Για την εκπαίδευση των μοντέλων χρησιμοποιήθηκε το 80% των διαθέσιμων σημάτων, δηλαδή σήματα από 3200 γαλαξίες με 1000 μετρήσεις ή features το καθένα. Τα υπόλοιπα σήματα (το 20%) χρησιμοποιήθηκαν για αξιολόγηση. Τέλος, και για τα δύο μοντέλα επιλέξαμε το πεδίο κωδικοποίησης (latent space) στις 50 διαστάσεις, που είναι επαρκείς για την κωδικοποίηση και συγχρόνως επιτρέπουν την αποδοτική εκπαίδευση και μετέπειτα επίλυση των αντίστροφων προβλημάτων.

Σχετικά με την εκπαίδευση κάναμε τις εξής τεχνικές επιλογές, έπειτα από εμπειρική μελέτη:

1. Για την μέθοδο GLO : Εκτελέσαμε εκπαίδευση σε 10000 εποχές σε ομάδες (batches) των 64 σημάτων. Για την βελτιστοποίηση χρησιμοποιήσαμε Adam [34] με learning rate 0.1 για τις παραμέτρους του μοντέλου και 0.01 για την κωδικοποίηση (latent code) . Κατα την εκπαίδευση, η κωδικοποίηση προβάλλεται εντός της μοναδιαίας μπάλας [11] στο latent space . Τέλος, ως συνάρτηση κόστους χρησιμοποιήθηκε το Mean Squared Error (MSE), ενώ για να αποφευχθεί το overfitting χρησιμοποιήθηκε weight decay με παράμετρο 0.001.
2. Για την χρήση GANs : Εκτελέσαμε εκπαίδευση σε 5000 εποχές σε ομάδες (batches) των 64 σημάτων. Για την βελτιστοποίηση χρησιμοποιήσαμε Adam με learning rate 0.1 για τον Generator και SGD με learning rate 0.05 και περιορισμό της νόρμας κάθε παραγώγου στην τιμή 100 για τον Discriminator . Κατα την εκπαίδευση, η κωδικοποίηση προβάλλεται εντός της μοναδιαίας μπάλας στο latent space . Τέλος, και πάλι χρησιμοποιήθηκε στο Generator weight decay με παράμετρο 0.001.

Σχετικά με την εκπαίδευση των GANs είναι σημαντικό να αναφερθούμε στο γεγονός ότι είναι ιδιαίτερα δύσκολη. Ειδικότερα, είναι ερευνητικό ζήτημα το πώς η εκπαίδευσή τους μπορεί αν οδηγήει στη σύγκλιση σε equilibrium. Η κοινότητα έχει προτείνει εμπειρικές τεχνικές και τεχνάσματα που διευκολύνουν την εκπαίδευση, τα οποία επικεντρώνονται σε εικόνες και αρχιτεκτονικές για πολυδιάστατα σήματα π.χ. CNNs . Όσο αφορά την εκπαίδευση, εμείς εφαρμόσαμε πολλές από αυτές τις τεχνικές όπως ανισορροπία μεταξύ της βελτιστοποίησης του Generator και του Discriminator με την χρήση διαφορετικών μεθόδων βελτιστοποίησης καθώς και learning rate . Επιπλέον, επιχειρήσαμε την εισαγωγή θορύβου στα labels για την εκπαίδευση του Discriminator καθώς και την εκπαίδευση του λιγότερο συχνά από των Generator . Ωστόσο, δεν έχουμε ακόμα πετύχει την κατασκευή ενός επαρκώς αποδοτικού μοντέλου.

Τέλος, για τα πειράματά μας χρησιμοποιήσαμε την βιβλιοθήκη ανοιχτού κώδικα για εφαρμογές μηχανικής μάθησης PyTorch [42].

5.3.2 Επίλυση Αντίστροφων Προβλημάτων

Με δεδομένο το γενετικό μοντέλο $G(\cdot)$, η διαδικασία επίλυσης ενός αντίστροφου προβλήματος είναι απλή: λαμβάνουμε τις μετρήσεις y , που στην περίπτωση μας είναι ένα ένα σήμα SED που έχει υποστεί κάποια γραμμική αλλοίωση η οποία περιγράφεται στο πίνακα A (έλλειψη μετρήσεων, προσθετικός θόρυβος κ.α.), και επιλύουμε το πρόβλημα βελτιστοποίησης:

$$\min_{z \in \text{latent space}} \frac{1}{m} \|AG(z) - y\|_2^2 \quad (5.1)$$

, δηλαδή ελαχιστοποιώντας το Mean Squared Error (MSE) μεταξύ των μετρήσεων που λαμβάνουμε ως δεδομένο και της αντίστοιχης εκτίμησης $G(\hat{z})$ στο πεδίο αναπαράστασης του γενετικού μοντέλου, αφού αυτή υποστεί όμοια αλλοίωση.

Φυσικά, αυτό το πρόβλημα βελτιστοποίησης δεν είναι κυρτό λόγω της μη-γραμμικότητας εντός του $G(\cdot)$. Ωστόσο, όπως έχουμε αναφέρει και σε προηγούμενο κεφάλαιο, μέσω της τεχνικής back propagation μπορούμε σχετικά αποδοτικά να διανεύουμε την πληροφορία της παραγώγου της συνάρτησης κόστους διαμέσω των επιπέδων του νευρωνικού δικτύου, δηλαδή της συνάρτησης που αντιστοιχεί στο γενετικό μοντέλο, και να βελτιστοποιήσουμε την κωδικοποίηση z προσεγγιστικά με αλγόριθμους όπως Adam , SGD ή απλό gradient descent .

Κατα την εκπαίδευση των μοντέλων, προκειμένου να περιορίσουμε το latent space σε έναν σημασιολογικά και πρακτικά συμπαγή χώρο, η κωδικοποίηση προβάλλεται εντός της μοναδιαίας μπάλας. Το ίδιο κάνουμε και κατά την επίλυση των αντίστροφων προβλημάτων. Μια άλλη τεχνική συνίσταται στο να κάνουμε έμμεσα τον περιορισμό αυτό μέσω regularization όπως προτείνεται στο [12] με έναν όρο της μορφής $L(z) = \lambda \|z\|_2^2$, όπου λ μία καθοριζόμενη παράμετρος ισορροπίας. Τότε έχουμε:

$$\min_{z \in \text{latent space}} \frac{1}{m} \|AG(z) - y\|_2^2 + L(z) \quad (5.2)$$

, χωρίς προβολή του z στην μοναδιαία μπάλα.

Τα αντίστροφα προβλήματα που εξετάζουμε για τα σήματα SED είναι τα εξής:

1. Η αφαίρεση προσθετικού θορύβου μικρής ενέργειας (denoising)
2. Η συμπλήρωση ενός παραθύρου μετρήσεων που αποκρύπτεται (inpainting)
3. Η συμπλήρωση τυχαίων μετρήσεων που αποκρύπτονται (super-resolution)
4. Η κλασική συνθήκη του compressed sensing με γκαουσιανές μετρήσεις. Το πρόβλημα αυτό δεν είναι πρακτικό αλλά παρουσιάζει θεωρητικό ενδιαφέρον.

5.3.3 Μέθοδοι Αξιολόγησης

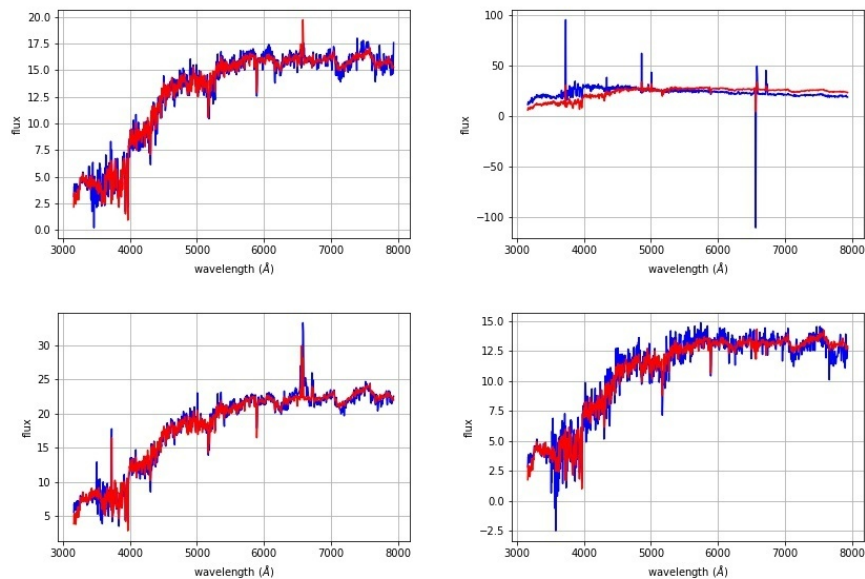
Αρχικά, πρέπει να υπογραμμίσουμε σε αυτό το σημείο ότι η επιτυχής εκπαίδευση ενός αποτελεσματικού γενετικού μοντέλου είναι πρωταρχικής σημασίας για την επιτυχία της μεθόδου. Αυτό θα έπρεπε να είναι αναμενόμενο καθώς κάθε εκτίμηση της μεθόδου περιορίζεται άμεσα από την αναπαραστατική ικανότητα του μοντέλου διότι αυτή πρέπει να ανήκει στον αναπαραστατικό του χώρο $G(\text{latent space})$. Ωστόσο, το πώς θα αξιολογηθεί το αν ένα γενετικό μοντέλο είναι επιτυχές είναι ανοιχτό ερευνητικό πρόβλημα. Στην πράξη τα γενετικά μοντέλα για εικόνες, μουσική ή κείμενο αξιολογούνται ποιοτικά με υποκειμενικό τρόπο από παρατηρητές. Όμως, γενετικά μοντέλα για δεδομένα όπως οι SEDs δεν είναι εύκολο να αξιολογηθούν με αυτόν τον τρόπο καθώς κανένας παρατηρητής δεν έχει την γνώση για το πώς πρέπει μοιάζει μία πραγματική SED. Ένας άλλος τρόπος να αξιολογηθεί ένα γενετικό μοντέλο είναι η ικανότητά του να αναπαριστά πραγματικά δεδομένα της οικογένειας για την οποία έχει κατασκευαστεί χωρίς αυτά να ανήκουν στο σύνολο δεδομένων με τα οποία εκπαιδεύτηκε. Αυτό το πρόβλημα θα το λέμε reconstruction ή inversion και μπορεί να θεωρηθεί ως αντίστροφο πρόβλημα όπου οι μετρήσεις ταυτίζονται με το σήμα. Με άλλα λόγια, προκύπτει το κυκλικό επιχείρημα που λέει ότι για να χαρακτηριστεί ένα γενετικό μοντέλο επιτυχές πρέπει να επιτρέπει την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων ενώ η αξιολόγησή του αποτελεί αντίστροφο πρόβλημα. Η αποδοτική αντιστροφή (inversion) ενός γενετικού μοντέλου, χωρίς το επιπρόσθετο λάθος της προσεγγιστικής βελτιστοποίησης που περιγράψαμε παραπάνω, μελετάται από την επιστημονική κοινότητα [37].

Για την ποσοτική αξιολόγηση των πειραμάτων μας θα χρησιμοποιήσουμε την μετρική MSE ενώ θα παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα και ποιοτικά.

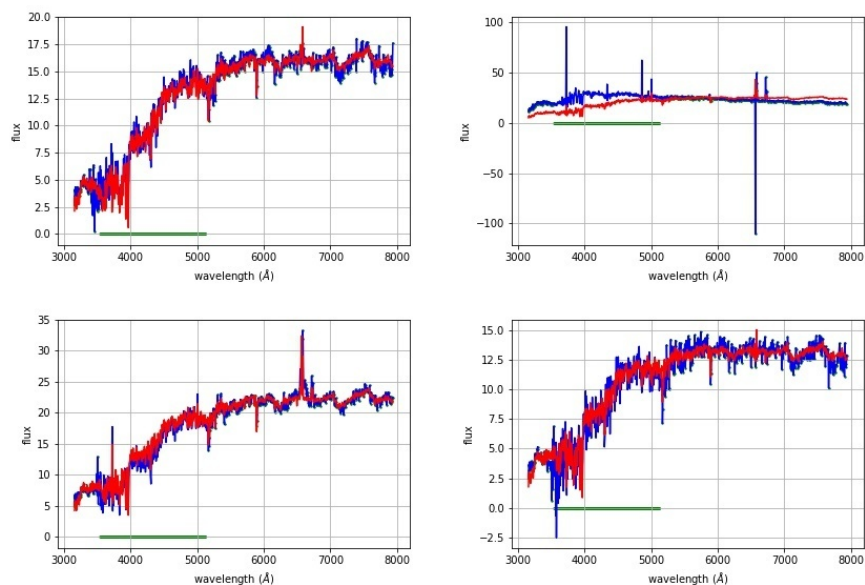
5.4 Αποτελέσματα

Παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της μεθόδου με χρήση του μοντέλου που κατασκευάσαμε με την μέθοδο GLO, όπως περιγράψαμε παραπάνω.

Αρχικά, παρουσιάζουμε ορισμένα ποιοτικά αποτελέσματα της μεθόδου σε συγκεκριμένα σήματα. Στο σχήμα 5.1 παρουσιάζονται τέσσερα σήματα και η ανακατασκευή τους από την μέθοδο, δηλαδή η εκτίμηση της μεθόδου καθώς επιλύει το αντίστροφο πρόβλημα inversion, προκειμένου να αξιολογηθεί η ποιότητα του ίδιου του γενετικού μοντέλου. Τα σήματα αυτά

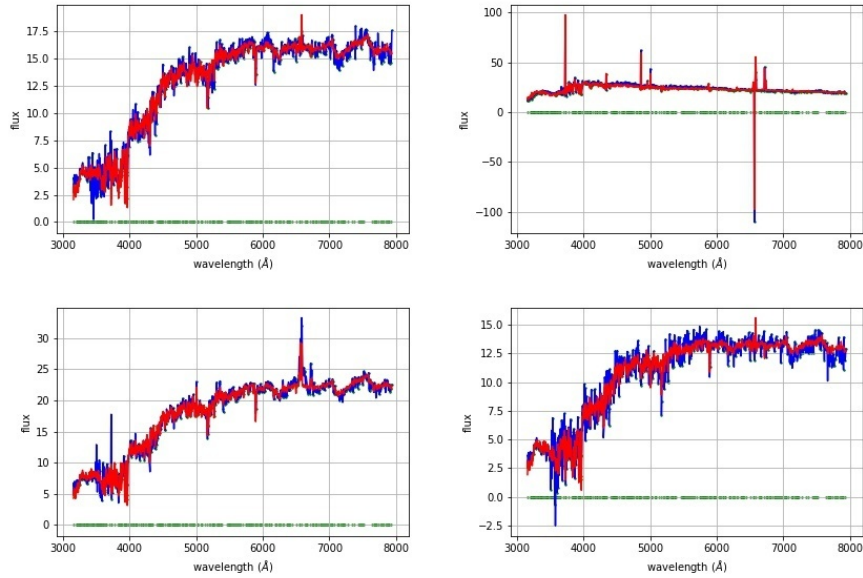


Σχήμα 5.1: Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στο reconstruction, ώστε να αξιολογηθεί η ικανότητα αντιστροφής του γενετικού μοντέλου. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.

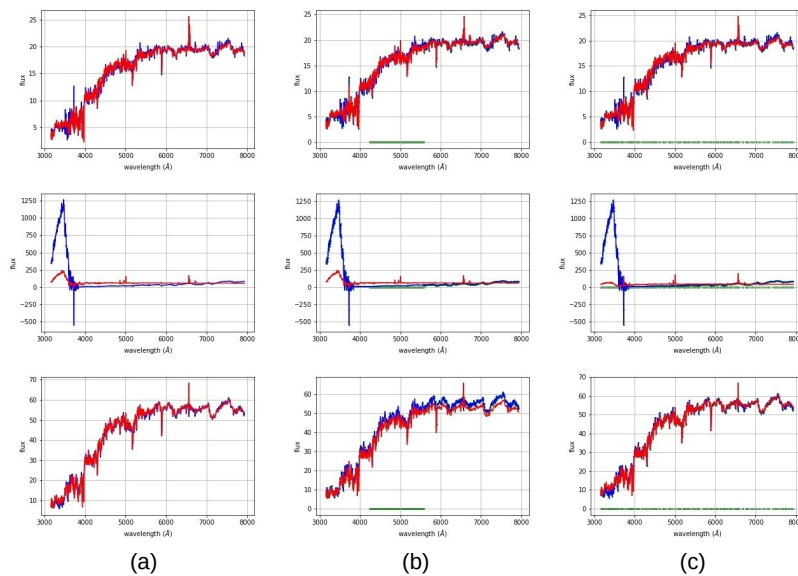


Σχήμα 5.2: Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στο inpainting. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα, με πράσινο είναι το παράθυρο που λείπει και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.

προέρχονται από τα test data, δηλαδή είναι **άγνωστα** στο γενετικό μας μοντέλο, και έτσι μας επιτρέπεται να εξάγουμε ασφαλή συμπεράσματα για την ποιότητά του και την ικανότητα γενίκευσης που παρουσιάζει. Τα σήματα στο πάνω μέρος του σχήματος 5.1 έχουν επιλεγεί από τα test data με βάση τον σφάλμα ανακατασκευής που παρουσιάζουν έτσι ώστε το αριστερά να εμφανίζει το μικρότερο σφάλμα ανακατασκευής, δηλαδή μπορεί να αναπαρασταθεί καλύτερα



Σχήμα 5.3: Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στο super-resolution. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα, με πράσινο είναι οι τιμές που λείπουν και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.



Σχήμα 5.4: Ποιοτικά αποτελέσματα του μοντέλου μας στα δεδομένα εκπαίδευσης. (a) reconstruction (b) inpainting (c) super-resolution. Με μπλέ είναι το αρχικό σήμα, με πράσινο είναι οι τιμές που λείπουν και με κόκκινο η εκτίμηση του αλγορίθμου.

από το γενετικό μοντέλο, και το δεξιά παρουσιάζει το μεγαλύτερο σφάλμα ανακατασκευής, δηλαδή το γενετικό μοντέλο «δυσκολεύεται» να το αναπαραστήσει. Το τελευταίο τοποθετείται στη μελέτη μας για λόγους ελέγχου της αποτελεσματικότητας της μεθόδου στην χειρότερη περίπτωση. Τα σήματα στο κάτω μέρος του σχήματος 5.1 έχουν επιλεγεί τυχαία από τα

test data. Βλέπουμε ότι το γενετικό μοντέλο πετυχαίνει ικανοποιητική ανακατασκευή καθώς η κόκκινη γραμμή, που αποτελεί την εκτίμηση της μεθόδου, ακολουθεί την μπλέ γραμμή, δηλαδή το αρχικό σήμα, σε ικανοποιητικό βαθμό στις μεταβολές υψηλής συχνότητας και σε άριστο βαθμό σε μεταβολές χαμηλής συχνότητας ή με άλλα λόγια στις περιοχές των σημάτων που χαρακτηρίζονται ως γόνατα. Επομένως, μπορούμε να ελπίζουμε ότι το γενετικό μας μοντέλο είναι υψηλής ποιότητας και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση δυσκολότερων αντίστροφων προβλημάτων σε άγνωστα σήματα με ελλιπή ή/και αλλοιωμένη πληροφορία.

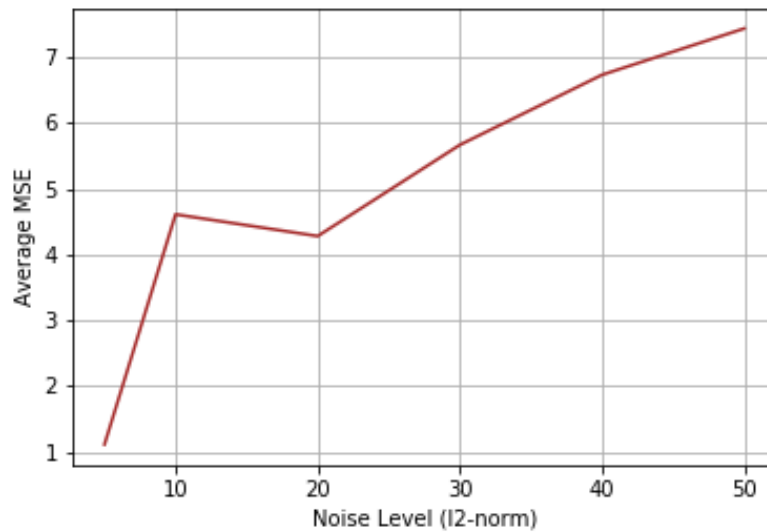
Στη συνέχεια, παρουσιάζουμε τα ίδια ακριβώς σήματα και τις αντίστοιχες εκτιμήσεις της μεθόδου μας για τα προβλήματα inpainting και super-resolution στα σχήματα 5.2 και 5.3 αντίστοιχα. Στην περίπτωση του inpainting η πράσινη περιοχή οριοθετεί το παράθυρο που λείπει και αποτελεί το 30% του σήματος. Μπορούμε να δούμε ότι η μέθοδος ανακατασκευάζει επιτυχώς το αρχικό σήμα στο παράθυρο αυτό καθώς η εκτίμηση και πάλι ακολουθεί στενά το αρχικό σήμα στην πλειονότητα των σημάτων. Στην περίπτωση του super-resolution τα πράσινα σημεία ορίζουν τις μετρήσεις που λείπουν, όπου το παράθυρο μεγέθους 30% έχει ανοίξει και οι μετρήσεις που λείπουν είναι διάσπαρτες στην έκταση του σήματος. Εδώ παρατηρούμε εξαιρετικά επιτυχή ανακατασκευή για όλα τα σήματα που εξετάζουμε.

Ολοκληρώνουμε την ποιοτική μας ανάλυση ελέγχοντας την αποτελεσματικότητα της μεθόδου στα training data στο σχήμα 5.4, ώστε να διαπιστώσουμε την ικανότητα γενίκευσης του γενετικού μοντέλου και πόσο αυτή επηρεάζει την επίδοση της μεθόδου. Το σήμα στο πάνω μέρος είναι εκείνο για το οποίο επιτυγχάνεται βέλτιστη αναπαράσταση, το σήμα στη μέση είναι αυτό με την χειρότερη αναπαράσταση και το σήμα στο κάτω μέρος επιλέχθηκε τυχαία από τα training data. Παρατηρούμε ότι το γενετικό μοντέλο γενικεύει αρκετά ικανοποιητικά με αποτέλεσμα η επίδοση της μεθόδου για την επίλυση αντίστροφων προβλημάτων (inpainting, super-resolution) να είναι συγκρίσιμη μεταξύ σημάτων από τα training και τα test data.

Για την ποσοτική ανάλυση επιλέγουμε το μέτρο MSE. Σε όλα τα σχήματα που εξετάζουμε, η καφέ καμπύλη αφορά την μέση απόδοση όπως υπολογίζεται από ένα τυχαία επιλεγμένο σύνολο 100 σημάτων από τα test data. Ο κάθετος άξονας αφορά τον μέσο όρο του σφάλματος MSE για το σύνολο των εξεταζόμενων σημάτων.

Το σχήμα 5.5 αφορά το αντίστροφο πρόβλημα denoising, όπου βλέπουμε τον μέσο όρο του σφάλματος ανάκτησης για διαφορετικά επίπεδα θορύβου. Τα επίπεδα θορύβου (l_2 -νόρμα) επιλέγονται να είναι μεγάλα αλλά στην ίδια τάξη μεγέθους με τα συνήθη επίπεδα τιμών των σημάτων που μας αφορούν ώστε το πρόβλημα να είναι δύσκολο. Πράγματι, η μέθοδος καταφέρνει να εξαλείψει τον θόρυβο σε μικρά επίπεδα ενώ έχουμε μία αυξητική τάση στο σφάλμα σε μεγάλα επίπεδα.

Τα σχήματα 5.6 και 5.7 αφορούν το αντίστροφο πρόβλημα inpainting, όπου βλέπουμε τον μέσο όρο του σφάλματος ανάκτησης για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας που αντιστοιχούν στο μέγεθος του παραθύρου. Στο σχήμα 5.6 συγκρίνεται η επίδοση της μεθόδου για διαφορετικές τεχνικές αντιστροφής, αυτή της προβολής της κωδικοποίησης στην μοναδιαία μπάλα (καφέ) και στην περίπτωση της εφαρμογής regularization (πράσινο). Προφανώς, η τεχνική που χρησιμοποιεί regularization αφήνει μεγαλύτερη ελευθερία στη μέθοδο για την διαμόρφωση της εκτίμησης και ως εκ τούτου είναι σταθερά πιο αποδοτική, δηλαδή παρουσιάζει

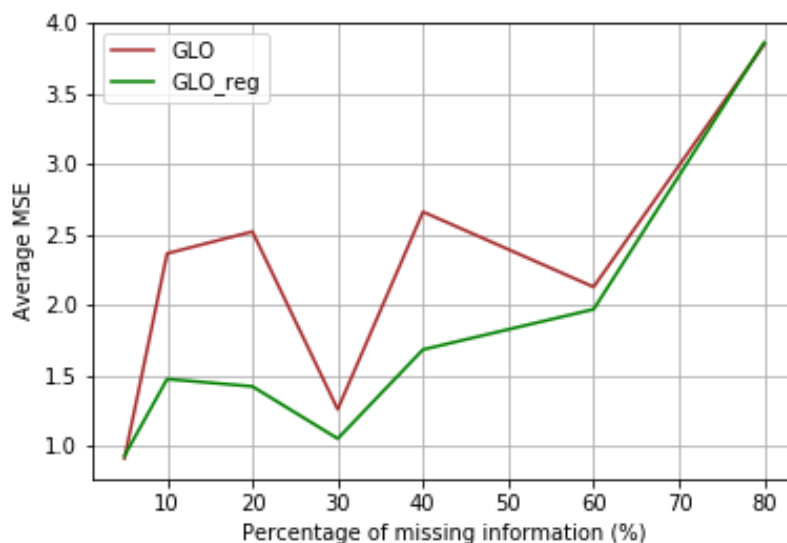


Σχήμα 5.5: Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο denoising. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά επίπεδα θορύβου.

μικρότερο σφάλμα. Στο σχήμα 5.7 συγκρίνεται η επίδοση της μεθόδου στα test (καφέ) και στα training data (πράσινο), προκειμένου να αξιολογηθεί η ικανότητα γενίκευσης του γενετικού μοντέλου και συνεπώς η απόδοση της μεθόδου σε άγνωστα σήματα. Η απόδοση στα training data είναι σχετικά καλύτερη ωστόσο η γενίκευση φαίνεται εξαιρετική σε σχετικά μικρά ποσοστά απώσας πληροφορίας όπου η μέθοδος φαίνεται ούτως ή άλλως πολύ επιτυχής. Σε όλες τις καμπύλες βλέπουμε ότι η μέθοδος είναι εξαιρετικά και σταθερά επιτυχής σε ποσοστά απώσας πληροφορίας που φτάνουν το 50% αλλά είναι ικανοποιητική ακόμα και σε μεγαλύτερα ποσοστά.

Ομοίως, το σχήμα 5.8 αφορά το αντίστροφο πρόβλημα super-resolution, όπου βλέπουμε τον μέσο όρο του σφάλματος ανάκτησης για διαφορετικά ποσοστά απώσας πληροφορίας που αντιστοιχούν στο πλήθος των μετρήσεων που απουσιάζουν. Το πρόβλημα αυτό ενέχει μεγαλύτερη τυχαιότητα και συνεπώς η καμπύλη που βλέπουμε δεν έχει την αναμενόμενη όψη. Ωστόσο, βλέπουμε το σφάλμα να διατηρείται σε πολύ μικρά επίπεδα ακόμα και για μεγάλα ποσοστά απώσας πληροφορίας.

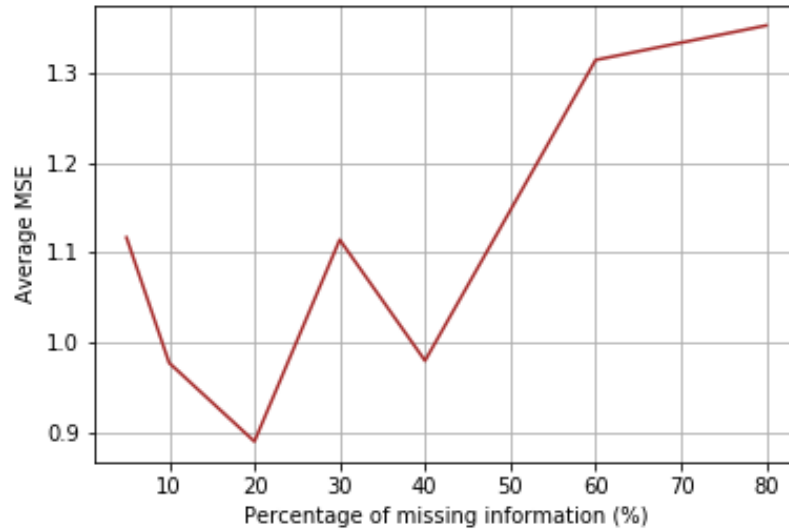
Τέλος, το σχήμα 5.9 αφορά το αντίστροφο πρόβλημα compressed sensing το οποίο παρουσιάζει θεωρητικό ενδιαφέρον. Βλέπουμε τον μέσο όρο του σφάλματος ανάκτησης για διαφορετικό πλήθος μετρήσεων. Το πλήθος των μετρήσεων επιλέχθηκε με βάση την θεωρητική ανάλυση προηγούμενου κεφαλαίου. Το αποτέλεσμα είναι το αναμενόμενο: από ένα πλήθος μετρήσεων και έπειτα (το οποίο προτείνεται από τη θεωρητική ανάλυση) έχουμε σταθερά μικρό σφάλμα που συμφωνεί με το προβλεπόμενο άνω φράγμα.



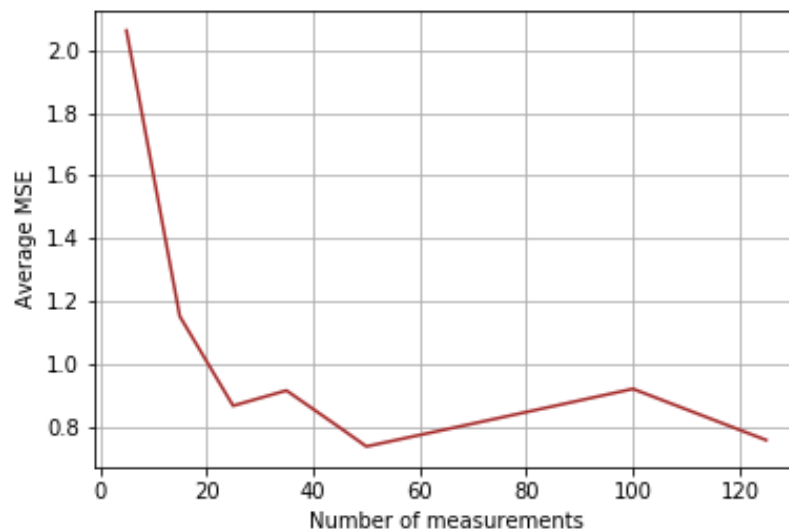
Σχήμα 5.6: Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο inpainting. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας (υπό μορφή παραθύρου). Παρουσιάζουμε την απόδοση της μεθόδου ανακατασκευής στην περίπτωση της προβολής της κωδικοποίησης στην μοναδιαία μπάλα (καφέ) και στην περίπτωση της εφαρμογής regularization (πράσινο).



Σχήμα 5.7: Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο inpainting. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο δύο σύνολα 100 σημάτων, από τα test data και από τα training data, στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας (υπό μορφή παραθύρου). Παρουσιάζουμε την απόδοση της μεθόδου ανακατασκευής για τα test data (καφέ) και για τα training data (πράσινο).



Σχήμα 5.8: Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο super-resolution. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικά ποσοστά απύσας πληροφορίας (υπό μορφή τυχαίων μετρήσεων).



Σχήμα 5.9: Ποσοτική αξιολόγηση του μοντέλου μας στο compressed sensing. Επιλέχθηκε με τυχαίο τρόπο ένα σύνολο 100 σημάτων από τα test data στα οποία εφαρμόσαμε την μέθοδο για διαφορετικό πλήθος μετρήσεων.

Βιβλιογραφία

- [1] A. Agarwal, S. Negahban, and M. J. Wainwright. Fast global convergence rates of gradient methods for high-dimensional statistical recovery. In J. D. Lafferty, C. K. I. Williams, J. Shawe-Taylor, R. S. Zemel, and A. Culotta, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 23*, pages 37–45. Curran Associates, Inc., 2010.
- [2] M. Antonini, M. Barlaud, P. Mathieu, and I. Daubechies. Image coding using wavelet transform. *Trans. Img. Proc.*, 1(2):205–220, Apr. 1992.
- [3] S. Athar, E. Burnaev, and V. Lempitsky. Latent convolutional models. In *International Conference on Learning Representations*, 2019.
- [4] F. Bach, R. Jenatton, J. Mairal, and G. Obozinski. Optimization with sparsity-inducing penalties. *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 4(1):1–106, 2012.
- [5] R. G. Baraniuk, V. Cevher, M. F. Duarte, and C. Hegde. Model-based compressive sensing. *IEEE Trans. Inf. Theor.*, 56(4):1982–2001, Apr. 2010.
- [6] M. Bertero and P. Boccacci. *Introduction to Inverse Problems in Imaging*,. Taylor & Francis, 1998.
- [7] P. J. Bickel, Y. Ritov, and A. B. Tsybakov. Simultaneous analysis of lasso and dantzig selector. *Ann. Statist.*, 37(4):1705–1732, 08 2009.
- [8] C. M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [9] D. M. Blei, A. Kucukelbir, and J. D. McAuliffe. Variational inference: A review for statisticians, 2016.
- [10] A. Blum, J. Hopcroft, and R. Kannan. *Foundations of Data Science*. Cambridge University Press, 2020.
- [11] P. Bojanowski, A. Joulin, D. Lopez-Paz, and A. Szlam. Optimizing the latent space of generative networks. 2017.
- [12] A. Bora, A. Jalal, E. Price, and A. G. Dimakis. Compressed sensing using generative models. In *Proceedings of the 34th International Conference on Machine Learning - Volume 70*, ICML’17, pages 537–546. JMLR.org, 2017.

- [13] S. Boyd and L. Vandenberghe. *Convex Optimization*. Cambridge University Press, New York, NY, USA, 2004.
- [14] E. J. Candes and T. Tao. Decoding by linear programming. *IEEE Transactions on Information Theory*, 51(12):4203–4215, Dec 2005.
- [15] E. J. Candès, J. K. Romberg, and T. Tao. Stable signal recovery from incomplete and inaccurate measurements. *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 59(8):1207–1223, 2006.
- [16] G.-H. Chen, J. Tang, and S. Leng. Prior image constrained compressed sensing (piccs): A method to accurately reconstruct dynamic ct images from highly undersampled projection data sets. *Medical Physics*, 35(2):660–663, 2008.
- [17] K. Davidson and S. Szarek. Local operator theory, random matrices and banach spaces. *Handbook on the Geometry of Banach spaces, Vol. 1*, pages 317–366, 01 2003.
- [18] D. L. Donoho. Compressed sensing. *IEEE Trans. Inf. Theor.*, 52(4):1289–1306, Apr. 2006.
- [19] D. L. Donoho and X. Huo. Uncertainty principles and ideal atomic decomposition. *IEEE Transactions on Information Theory*, 47(7):2845–2862, Nov 2001.
- [20] M. F. Duarte, M. A. Davenport, D. Takhar, J. N. Laska, T. Sun, K. F. Kelly, and R. G. Baraniuk. Single-pixel imaging via compressive sampling. *IEEE Signal Processing Magazine*, 25(2):83–91, March 2008.
- [21] A. Feuer and A. Nemirovski. On sparse representation in pairs of bases. *IEEE Transactions on Information Theory*, 49(6):1579–1581, June 2003.
- [22] R. Foygel and L. W. Mackey. Corrupted sensing: Novel guarantees for separating structured signals. *CoRR*, abs/1305.2524, 2013.
- [23] I. Goodfellow, Y. Bengio, and A. Courville. *Deep Learning*. MIT Press, 2016. <http://www.deeplearningbook.org>.
- [24] I. J. Goodfellow, J. Pouget-Abadie, M. Mirza, B. Xu, D. Warde-Farley, S. Ozair, A. Courville, and Y. Bengio. Generative adversarial networks, 2014.
- [25] B. D. Haeffele and R. Vidal. Global optimality in neural network training. In *2017 IEEE Conference on Computer Vision and Pattern Recognition (CVPR)*, pages 4390–4398, July 2017.
- [26] R. Heckel and M. Soltanolkotabi. Denoising and regularization via exploiting the structural bias of convolutional generators. In *International Conference on Learning Representations*, 2020.

- [27] C. Hegde, M. F. Duarte, and V. Cevher. Compressive sensing recovery of spike trains using a structured sparsity model. In R. Gribonval, editor, *SPARS'09 - Signal Processing with Adaptive Sparse Structured Representations*, Saint Malo, France, 04 2009. Inria Rennes - Bretagne Atlantique.
- [28] C. Hegde, P. Indyk, and L. Schmidt. A nearly-linear time framework for graph-structured sparsity. In *Proceedings of the Twenty-Fifth International Joint Conference on Artificial Intelligence, IJCAI'16*, pages 4165–4169. AAAI Press, 2016.
- [29] S. Ioffe and C. Szegedy. Batch normalization: Accelerating deep network training by reducing internal covariate shift. In *Proceedings of the 32nd International Conference on International Conference on Machine Learning - Volume 37, ICML'15*, page 448–456. JMLR.org, 2015.
- [30] G. Jagatap and C. Hegde. Algorithmic guarantees for inverse imaging with untrained network priors. *CoRR*, abs/1906.08763, 2019.
- [31] P. Jain and P. Kar. Non-convex optimization for machine learning. *Foundations and Trends® in Machine Learning*, 10(3-4):142–336, 2017.
- [32] M. Kabkab, P. Samangouei, and R. Chellappa. Task-aware compressed sensing with generative adversarial networks. *CoRR*, abs/1802.01284, 2018.
- [33] C. S. H. Kaushik, T. Gautam, and V. Elamaram. A tutorial review on discrete fourier transform with data compression application. pages 1–6, March 2014.
- [34] D. Kingma and J. Ba. Adam: A method for stochastic optimization. *International Conference on Learning Representations*, 12 2014.
- [35] D. P. Kingma and M. Welling. Auto-encoding variational bayes, 2013.
- [36] D. P. Kingma and M. Welling. An introduction to variational autoencoders. *CoRR*, abs/1906.02691, 2019.
- [37] Q. Lei, A. Jalal, I. S. Dhillon, and A. G. Dimakis. Inverting deep generative models, one layer at a time. *CoRR*, abs/1906.07437, 2019.
- [38] P.-L. Loh and M. J. Wainwright. High-dimensional regression with noisy and missing data: Provable guarantees with nonconvexity. *The Annals of Statistics*, 40(3):1637–1664, Jun 2012.
- [39] M. Lustig, D. Donoho, and J. M. Pauly. Sparse mri: The application of compressed sensing for rapid mr imaging. *Magnetic Resonance in Medicine*, 58(6):1182–1195, 2007.
- [40] M. Mardani, H. Monajemi, V. Pappayan, S. Vasanawala, D. L. Donoho, and J. M. Pauly. Recurrent generative adversarial networks for proximal learning and automated compressive image recovery. *CoRR*, abs/1711.10046, 2017.

- [41] S. N. Negahban, P. Ravikumar, M. J. Wainwright, and B. Yu. A unified framework for high-dimensional analysis of m -estimators with decomposable regularizers. *Statistical Science*, 27(4):538–557, Nov 2012.
- [42] A. Paszke, S. Gross, S. Chintala, G. Chanan, E. Yang, Z. DeVito, Z. Lin, A. Desmaison, L. Antiga, and A. Lerer. Automatic differentiation in pytorch. 2017.
- [43] K. R. Rao and P. Yip. *Discrete Cosine Transform: Algorithms, Advantages, Applications*. Academic Press Professional, Inc., San Diego, CA, USA, 1990.
- [44] S. Rey, A. G. Marques, and S. Segarra. An underparametrized deep decoder architecture for graph signals. 2019.
- [45] G. Strang. *Linear algebra and its applications*. Thomson, Brooks/Cole, Belmont, CA, 2006.
- [46] R. T. T. Hastie and M. J. Wainwright. *Statistical Learning with Sparsity: the Lasso and Generalizations*. Chapman and Hall/CRC Press, Series in Statistics and Applied Probability., 2015.
- [47] R. Tibshirani. Regression shrinkage and selection via the lasso. *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, 58(1):267–288, 1996.
- [48] D. Ulyanov, A. Vedaldi, and V. S. Lempitsky. Deep image prior. *CoRR*, abs/1711.10925, 2017.
- [49] J. Vanderplas, A. Connolly, Ž. Ivezić, and A. Gray. Introduction to astroml: Machine learning for astrophysics. In *Conference on Intelligent Data Understanding (CIDU)*, pages 47–54, oct. 2012.
- [50] D. V. Veen, A. Jalal, M. Soltanolkotabi, E. Price, S. Vishwanath, and A. G. Dimakis. Compressed sensing with deep image prior and learned regularization. 2018.
- [51] R. Vershynin. Introduction to the non-asymptotic analysis of random matrices. 2010.
- [52] R. Vershynin. High-dimensional probability. 2019.
- [53] A. Virmaux and K. Scaman. Lipschitz regularity of deep neural networks: analysis and efficient estimation. In S. Bengio, H. Wallach, H. Larochelle, K. Grauman, N. Cesa-Bianchi, and R. Garnett, editors, *Advances in Neural Information Processing Systems 31*, pages 3835–3844. Curran Associates, Inc., 2018.
- [54] E. D. Vito, L. Rosasco, A. Caponnetto, U. D. Giovannini, and F. Odone. Learning from examples as an inverse problem. *J. Mach. Learn. Res.*, 6:883–904, Dec. 2005.
- [55] M. J. Wainwright. *High-Dimensional Statistics: A Non-Asymptotic Viewpoint*. Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics. Cambridge University Press, 2019.

-
- [56] J. Walcher, B. Groves, T. Budavári, and D. Dale. Fitting the integrated spectral energy distributions of galaxies. *Astrophysics and Space Science*, 331(1):1–51, Aug 2010.
- [57] A. O. Zaid, C. Olivier, and F. Marmoiton. Wavelet image coding with parametric thresholding: application to JPEG2000. In E. R. Dougherty, J. T. Astola, and K. O. Egiazarian, editors, *Image Processing: Algorithms and Systems II*, volume 5014, pages 346 – 353. International Society for Optics and Photonics, SPIE, 2003.
- [58] H. Zhang and W. Yin. Gradient methods for convex minimization: better rates under weaker conditions, 2013.

