

# 第5回 コンピューテーショナル・インテリジェンス 研究会資料

期日：2014年7月1日（火）～2日（水）  
会場：慶應義塾大学日吉キャンパス

# SICE®

主 催：計測自動制御学会 システム・情報部門  
企 画：コンピューテーショナル・インテリジェンス部会  
協 賛：情報処理学会，システム制御情報学会，電子情報通信学会，  
電気学会，日本神経回路学会，日本機械学会，人工知能学会，  
日本知能情報ファジィ学会，ヒューマンインタフェース学会，  
進化計算学会， Japan Chapter of IEEE Computational Intelligence  
Society， Japan Chapter of IEEE Systems, Man, and Cybernetics  
Society

カタログ番号 14PG0008

## プログラム 7月1日(火)

---

### 10:30~12:00 進化計算 司 会:岡本 卓(千葉大学)

Linear Population Size Reduction を用いた SHADE

○田邊 遼司, 福永 Alex (東京大学)

Differential Evolution における回転不変性を考慮した超球交叉の提案

○金政 実, 相吉 英太郎 (慶應義塾大学)

離散最適化向け進化計算手法 Re-labeling Differential Evolution の

少個体時探索能力に関する考察

○船木 亮平, 高野 浩貴, 村田純一 (九州大学)

---

### 13:00~15:30 CIシステム 司 会:相吉 英太郎(慶應義塾大学)

簡易センサーのネットワークに基づく行動パターン認識

○蔡 家銘 (会津大学), 陳 栄静 (朝陽科技大学), 多屋 優人 (KDDI 研究所)

趙 強福 (会津大学)

レシピオントロジに基づく食物の推薦システムの構築

○丁 昱銜 (会津大学), 陳 栄静 (朝陽科技大学), 趙 強福 (会津大学)

未知の問題状況に対処するための脳機能

—「試行錯誤による探索」と「知識による解決」:2 つの方略を司る神経機構—

○小川 正 (京都大学)

リズム現象における周期感度の解析法

黒江 康明, ○森 禎弘 (京都工芸繊維大学)

制約ネットワークにおける不良設定問題を解く一手法

○鈴木 秀明 (情報通信研究機構)

---

### 15:45~17:45 パネル討論会

「コンピューテーショナル・インテリジェンス分野の研究展望と組織連携」

パネラー:半田 久志 (近畿大学), 倉橋 節也 (筑波大学), 村田 純一(九州大学)

司 会:本間 経康 (東北大学)

コンピューテーショナル・インテリジェンス(CI)研究会の企画を行っている2 部会のうち, CI 部会は今年ニューラルネットワーク部会から CI 部会へと新たな看板を掲げ, CI に関する研究を積極的に推進していくことになりました. この機会に, CI 分野の研究展望と学会内外の連携について, パネル討論を行います.

---

### 18:00~20:00 技術交流会

---

7月2日(水)

---

**10:00~12:00 連想・学習・識別 司会:黒江 康明(京都工芸繊維大学)**

実行可能化演算を伴う進化計算アルゴリズムを用いた連想記憶モデルのパラメータ最適化  
○増田 和明 (神奈川大学)

マルチタスク学習用ニューラルネットワークのサイズ過不足評価法  
○柴田 淳司, 董 芳艶, 廣田 薫 (東京工業大学)

Analysis on Parameter Sensitivity of the Simplest Self-Organizing Classifiers  
○Vargas, Danilo Vasconcellos, 高野 浩貴, 村田純一 (九州大学)

判別分析の新世界  
○新村 秀一 (成蹊大学)

---

**13:00~14:30 視覚情報処理・ロボット 司会:増田 和明(神奈川大学)**

6軸センサ付きカメラを用いた三次元計測のための対応点分類法  
○赤松 俊弘, 董 芳艶, 廣田 薫 (東京工業大学)

Hand-eye-vergence Visual Servoing in Camera-depth Direction  
○崔 禹, 前田 耕市, 西村 健太, 須浪 唯介, 矢納 陽, 松野 隆幸, 見浪 護 (岡山大学)

Dynamic Reconfiguration Manipulability of Bipedal Humanoid Walking  
○馮 陶然, 小林 洋祐, 見浪 護, 矢納 陽, 松野 隆幸 (岡山大学)

---

**テーマセッション: SICE 先端融合システムズアプローチ創出委員会 応用クリフォード代数 WG の提案**

**14:45~16:15 高次元ニューラルネットワーク1 司会:新田 徹(産業技術総合研究所)**

複素ホップフィールドネットワークに関する勾配降下学習の雑音耐性  
○小林 正樹 (山梨大学)

探索枝刈りによる複素多層パーセプトロン探索の高速化  
○佐藤 聖也, 中野 良平 (中部大学)

ミリ波イメージングにおける適応的区分化のための複素自己組織化マップのダイナミクス  
○有馬 悠也, 廣瀬 明 (東京大学)

---

**16:30~18:00 高次元ニューラルネットワーク2 司会:小林 正樹(山梨大学)**

コンピュータショナルインテリジェンスの視点から見た無人帆走の課題  
○真鍋 秀朗, 橘 完太 (工学院大学)

Cayley-Dickson 線形システムのための実同型変換と超複素オンライン学習への応用  
○溝口 毅彦, 山田 功 (東京工業大学)

3層複素ニューラルネットワークの特異点近傍における学習ダイナミクス  
○新田 徹 (産業技術総合研究所)

---

# Linear Population Size Reduction を用いた SHADE

○田邊遼司 福永 Alex (東京大学大学院)

## SHADE with Linear Population Size Reduction

\*R. Tanabe and A. Fukunaga (The University of Tokyo)

**Abstract**— Success-History based Adaptive Differential Evolution (SHADE) is an adaptive DE which incorporates success-history based parameter adaptation and one of the state-of-the-art DE algorithms. This paper proposes L-SHADE, which further extends SHADE with Linear Population Size Reduction (LPSR), which continually decreases the population size according to a linear function. We evaluated the performance of L-SHADE on CEC2014 benchmarks and compared its search performance with the state-of-the-art restart CMA-ES variants. The experimental results show that L-SHADE is quite competitive with them.

**Key Words:** Differential Evolution, Parameter Adaptation, Real Parameter Optimization

NOTE: This is a shortened version of our IEEE CEC-2014 paper [12].

## 1 Introduction

Differential Evolution (DE) is an efficient Evolutionary Algorithm (EA) that was primarily designed for real parameter optimization problems [9]. Unfortunately, as with other EAs, the search performance of DE algorithms depends on control parameter settings such as the population size  $N$ , crossover rate  $CR$  and scaling factor  $F$ . Thus, adaptive DE algorithms which can adjust their own control parameters on-line during the search have been studied by many researchers.

Success-History based Adaptive DE (SHADE) [11] is an improved version of JADE [13] which uses a different parameter adaptation mechanism based on this success-history based adaptation. This adaptation technique uses a historical memory  $M_{CR}, M_F$  which stores a sets of  $CR, F$  values that have performed well in the past, and generate new  $CR, F$  pairs by directly sampling the parameter space close to one of these stored pairs. In [11], we experimentally showed that these SHADE variants outperform previous state-of-the-art DE algorithms, including JADE [13].

While SHADE, as well as almost adaptive DE algorithms, automatically adjusts the  $CR$  and  $F$  parameters, the population size  $N$  remains constant throughout the search. In general, the size of the population used by EA plays a significant role in controlling the rate of convergence. However, its appropriate size depends on problem difficulty. Addition, compared to other control parameter (e.g.  $F$  and  $CR$ ), adaptation of population size has proven difficult [7]. In recent years, population resizing methods based on simple, deterministic rules (as opposed to adaptive schemes) have been proposed [1, 2, 4]. These approaches have been found to be highly effective for improving EA performance.

In the deterministic population resizing method, we focus on deterministic population reduction methods [2, 4]. In general, while explorative search is preferred

in the beginning of the EA search for estimating the promising regions, exploitative search is appropriate for finding the higher precision solutions. According to this general policy, the deterministic population reduction methods use a relatively large population size as initial population and reduce its size gradually. As a result, the search is executed with a small population size and becomes more exploitative. This mechanism makes EA more robust and effective.

This paper proposes L-SHADE [12], which is a most sophisticated SHADE algorithm and incorporates Linear Population Size Reduction (LPSR), a simple deterministic population resizing method which continuously reduces the population size in accordance with a linear function. Our LPSR method is a special case of SVPS [4] which reduces the population linearly, and requires only 1 parameter (initial population sizes).

We compared L-SHADE with NBIPOP-A CMA-ES [8] and iCMAES-ILS [6] which are state-of-the-art restart CMA-ES [1] variants. Our results show that L-SHADE is highly competitive with them.

## 2 L-SHADE: SHADE with Linear Population Size Reduction

This section describes L-SHADE [12] with Algorithm 1. A DE population is represented as a set of real parameter vectors  $\mathbf{x}_i = (x_1, \dots, x_D)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , where  $D$  is the dimensionality of the target problem, and  $N$  is the population size. In line 2, at the beginning of the search, the individual vectors  $\mathbf{x}_i$  in population are initialized randomly. The contents of  $M_{CR,i}, M_{F,i}$  ( $i = 1, \dots, H$ ) are also all initialized to 0.5 in line 3. Then, a process of trial vector generation and selection are repeated until some termination criterion is encountered.

In line 7–9, in each generation  $G$ , the control parameters  $CR_i$  and  $F_i$  used by each individual  $\mathbf{x}_i$  are generated by randomly selecting an index  $r_i$  from  $[1, H]$ . In line 8, if  $M_{CR,r_i}$  has been assigned the “terminal value”  $\perp$ ,  $CR_i$  is set to 0. In case a value for

---

**Algorithm 1: L-SHADE algorithm**

---

```
// Initialization phase
1  $G = 1$ ,  $N_G = N^{init}$ , Archive  $\mathbf{A} = \emptyset$ ;
2 Initialize population  $\mathbf{P}_G = (\mathbf{x}_{1,G}, \dots, \mathbf{x}_{N,G})$ 
   randomly;
3 Set all values in  $M_{CR}$ ,  $M_F$  to 0.5;
// Main loop
4 while The termination criteria are not met do
5    $S_{CR} = \emptyset$ ,  $S_F = \emptyset$ ;
6   for  $i = 1$  to  $N$  do
7      $r_i = \text{Select from } [1, H] \text{ randomly}$ ;
8     If  $M_{CR,r_i} = \perp$ ,  $CR_{i,G} = 0$ . Otherwise
9        $CR_{i,G} = \text{randn}_i(M_{CR,r_i}, 0.1)$ ;
10       $F_{i,G} = \text{randc}_i(M_{F,r_i}, 0.1)$ ;
11      Generate trial vector  $\mathbf{u}_{i,G}$  according to
12      current-to-pbest/1/bin;
13    for  $i = 1$  to  $N$  do
14      if  $f(\mathbf{u}_{i,G}) \leq f(\mathbf{x}_{i,G})$  then
15         $\mathbf{x}_{i,G+1} = \mathbf{u}_{i,G}$ ;
16      else
17         $\mathbf{x}_{i,G+1} = \mathbf{x}_{i,G}$ ;
18      if  $f(\mathbf{u}_{i,G}) < f(\mathbf{x}_{i,G})$  then
19         $\mathbf{x}_{i,G} \rightarrow \mathbf{A}$ ,  $CR_{i,G} \rightarrow S_{CR}$ ,  $F_{i,G} \rightarrow S_F$ ;
20    If necessary, delete randomly selected
21    individuals from the archive such that the
22    archive size is  $|\mathbf{A}|$ .
23    Update memories  $M_{CR}$  and  $M_F$  (Algorithm 2);
24    // Optional LPSR strategy
25    Calculate  $N_{G+1}$  according to Eq. (2);
26    if  $N_G < N_{G+1}$  then
27      Sort individuals in  $\mathbf{P}$  based on their fitness
28      values and delete lowest  $N_G - N_{G+1}$ 
29      members;
30      Resize archive size  $|\mathbf{A}|$  according to new
31       $|\mathbf{P}|$ ;
32     $G = G + 1$ ;
```

---

$CR_i$  outside of  $[0, 1]$  is generated, it is replaced by the limit value (0 or 1) closest to the generated value. When  $F_i > 1$ ,  $F_i$  is truncated to 1, and when  $F_i \leq 0$ , line 9 is repeatedly applied to try to generate a valid value. These manners are according to the procedure for JADE [13].

In line 10, a mutant vector  $\mathbf{v}_{i,G}$  is generated from an existing population members by applying the current-to-pbest/1 mutation strategy:  $\mathbf{v}_{i,G} = \mathbf{x}_{i,G} + F_i \cdot (\mathbf{x}_{pbest,G} - \mathbf{x}_{i,G}) + F_i \cdot (\mathbf{x}_{r_1,G} - \mathbf{x}_{r_2,G})$  [13]. Individual  $\mathbf{x}_{pbest,G}$  is randomly selected from the top  $N \times p$  ( $p \in [0, 1]$ ) members in generation  $G$ . The parameter  $p$  controls a trade-off between exploitation and exploration (small  $p$  behaves more greedily). The indices  $r_1, r_2$  are randomly selected from  $[1, N]$  such that they differ from each other as well as  $i$ .

After generating the mutant vector  $\mathbf{v}_{i,G}$ , it is crossed with the parent  $\mathbf{x}_{i,G}$  in order to generate trial vector  $\mathbf{u}_{i,G}$ . In SHADE, Binomial Crossover, which is the most commonly used crossover operator in DE, is used and implemented as follows: For each  $j$  ( $j = 1, \dots, D$ ), if  $\text{rand}[0, 1] \leq CR$  or  $j = j_{rand}$ ,  $u_{j,i,t} = v_{j,i,t}$ . Otherwise,  $u_{j,i,t} = x_{j,i,t}$ .  $\text{rand}[0, 1]$  denotes a uniformly selected random number from  $[0, 1]$ , and  $j_{rand}$  is a decision variable index which is uniformly randomly selected from  $[1, D]$ .

In line 11–17, after all of the trial vectors  $\mathbf{u}_{i,G}$ ,  $1 \leq i \leq N$  have been generated, a selection process determines the survivors for the next generation. The selection operator in standard DE compares each individual  $\mathbf{x}_{i,G}$  against its corresponding trial vector  $\mathbf{u}_{i,G}$ , keeping the better vector in the population.

In JADE, an optional, external archive is used for maintaining diversity [13]. As well as JADE, SHADE also uses it. Parent vectors  $\mathbf{x}_{i,G}$  which were worse than the trial vectors  $\mathbf{u}_{i,G}$  are preserved as line 16–17. When the archive is used,  $\mathbf{x}_{r_2,G}$  in current-to-pbest/1 is selected from  $\mathbf{P} \cup \mathbf{A}$ , the union of the population  $\mathbf{P}$  and the archive  $\mathbf{A}$ .

In each generation,  $CR_i$  and  $F_i$  values that succeed in generating a trial vector  $\mathbf{u}_{i,G}$  which is better than the parent individual  $\mathbf{x}_{i,G}$  are recorded as  $S_{CR}, S_F$  in line 17. Then, at the end of the generation, the memory contents are updated using Algorithm 2. In

---

**Algorithm 2: Memory update algorithm**

---

```
1 if  $S_{CR} \neq \emptyset$  and  $S_F \neq \emptyset$  then
2   if  $M_{CR,k,G} = \perp$  or  $\max(S_{CR}) = 0$  then
3      $M_{CR,k,G+1} = \perp$ ;
4   else
5      $M_{CR,k,G+1} = \text{mean}_{WL}(S_{CR})$ ;
6    $M_{F,k,G+1} = \text{mean}_{WL}(S_F)$ ;
7    $k = k + 1$  (If  $k > H$ ,  $k = 1$ );
8 else
9    $M_{CR,k,G+1} = M_{CR,k,G}$ ,  $M_{F,k,G+1} = M_{F,k,G}$ ;
```

---

Algorithm 2, an index  $k$  ( $1 \leq k \leq H$ ) determines the position in the memory to update. In generation  $G$ , the  $k$ -th element in the memory is updated. At the beginning of the search  $k$  is initialized to 1.  $k$  is incremented whenever a new element is inserted into the history. If  $k > H$ ,  $k$  is set to 1. In Algorithm 2, the weighted Lehmer mean  $\text{mean}_{WL}(S)$  is computed using the formula below. Where the amount of fitness improvement  $\Delta f_k = |f(\mathbf{u}_{k,G}) - f(\mathbf{x}_{k,G})|$  is used in order to influence the parameter adaptation ( $S$  refers to either  $S_{CR}$  or  $S_F$ ).

$$\text{mean}_{WL}(S) = \frac{\sum_{k=1}^{|S|} w_k \cdot S_k^2}{\sum_{k=1}^{|S|} w_k \cdot S_k}, w_k = \frac{\Delta f_k}{\sum_{l=1}^{|S_{CR}|} \Delta f_l} \quad (1)$$

As  $M_{CR}$  is updated, if  $M_{CR,k,G} = \perp$  (where  $\perp$  denotes a special, “terminal value”) or  $\max(S_{CR}) = 0$  (i.e., all elements of  $S_{CR}$  are 0),  $M_{CR,k,G+1}$  is set to  $\perp$ . Thus, if  $M_{CR}$  is assigned the terminal value  $\perp$ , then  $M_{CR}$  will remain fixed at  $\perp$  until the end of the search. This has the effect of locking  $CR_i$  to 0 until the end of the search, causing the algorithm to enforce a “change-one-parameter-at-a-time” policy, which tends to slow down convergence, and is effective on multimodal problems.

Lines 20–23 implement the LPSR, a simple specialization of SVPS [4] population reduction scheme used by L-SHADE. LPSR continuously reduces the population to match a linear function where the population size at generation 1 is  $N^{init}$ , and the population at the end of the run is  $N^{min}$ . After each generation  $G$ ,

the population size in the next generation,  $N_{G+1}$ , is computed according to the formula:<sup>1</sup>

$$N_{G+1} = \text{round} \left[ \left( \frac{N^{\min} - N^{\text{init}}}{\text{MAX\_NFE}} \right) \cdot \text{NFE} + N^{\text{init}} \right] \quad (2)$$

$N^{\min}$  is set to the smallest possible value such that the evolutionary operators can be applied – in the case of L-SHADE,  $N^{\min} = 4$  because the current-to-pbest mutation operator requires 4 individuals.  $\text{NFE}$  is the current number of fitness evaluations, and  $\text{MAX\_NFE}$  is the maximum number of fitness evaluations. Whenever  $N_{G+1} < N_G$ , the  $(N_G - N_{G+1})$  worst-ranking individuals are deleted from the population.

### 3 Evaluating L-SHADE on the CEC2014 benchmarks

#### 3.1 Settings

This section presents an empirical evaluation of L-SHADE on the CEC2014 benchmark set which consists of 30 test functions [5]. (See [5] for details.) We performed our evaluation following the guidelines of the CEC2014 benchmark competition [5]. When the gap between the values of the best solution found and the optimal solution was  $10^{-8}$  or smaller, the error (score) was treated as 0. For all of the problems the number of dimensions  $D = 10, 30, 50, 100$ , and the maximum number of objective function calls per run was  $D \times 10,000$ . The number of runs per problem was 51, and the average performance of these runs was evaluated.

The 4 control parameters of L-SHADE are set as follows: the initial population size  $N^{\text{init}} = \text{round}(18 \times D)$ , the archive size  $|\mathbf{A}| = \text{round}(2.6 \times N^{\text{init}})$ ,  $p = 0.11$  and the memory size  $H = 6$ . These settings were tuned by ParamILS [3] (see [12] for details).

Currently, restart CMA-ES methods based on IPOP-CMA-ES [1] are considered the state-of-the-art methods for single objective, real parameter optimization problems. Especially, NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES [8] and iCMAES-ILS [6] are one of the most efficient algorithms in them because they tied for first place in the recent competition held at CEC-2013 [10]. Therefore, we compared our L-SHADE with them. The source code for iCMAES-ILS and NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES, were downloaded from [10]. We minimally modified these programs so that they would work with the CEC2014 benchmark codes. NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES and iCMAES-ILS have several characteristics in common: (1) they are based on CMA-ES, (2) restarts are performed, (3) the deterministic population increasing strategy is used, (4) the algorithms are extremely complex. All of these features are in direct contrast to L-SHADE.

<sup>1</sup>Eq. (2) is almost equivalent to SVPS when the SVPS control parameters are set to  $\tau = 1, \rho = 0$ . See [4] for a detailed description of SVPS.

### 3.2 Results and discussions

The compared results for all 30 CEC2014 functions, for all dimension size  $D = \{10, 30, 50, 100\}$ , and for all 51 runs are shown in Figure 1(a). Figure 1(a) represents a normalized mean aggregated rank which calculated based on the error value of best-so-far solutions after  $10,000 \times D \times r$  ( $r \in (0, 1]$ ) times objective function calls according to the procedure of the CEC2013 competition [10] (See [10] for details). In Figures 1, the method which has lower rank is better than the compared methods. Addition to the results on all 30 functions (Figure 1(a)), we also classified the 30 functions into 4 groups: 3 unimodal functions (Figure 1(b)), 13 simple multimodal functions (Figure 1(c)), 6 hybrid functions (Figure 1(d)), 8 composition functions (Figure 1(e)), and evaluated the performance on both groups separately.

From Figures 1(a) ~ (e), we can see that the rank of L-SHADE at the beginning of the search is significantly higher than NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES and iCMAES-ILS (i.e. L-SHADE is worse than them). This is because that the initial population size in L-SHADE is very large so that its search can be encouraged wider exploration of the search space and the rate of convergence tends to be slower. On the other hand, the initial population size in NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES and iCMAES-ILS is relatively small and doubles the population size after each restart, broadening the search after each restart. Therefore, NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES and iCMAES-ILS can outperform L-SHADE at the early phase of the search.

As the search progresses, the rank of L-SHADE becomes low gradually since the population size in L-SHADE continually decreases so that its search tends to result in convergence. From Figure 1(a), after about eighty percent of the maximum number of objective function calls, L-SHADE achieves lower rank than NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES. Addition, the search performance of L-SHADE is also better than iCMAES-ILS at the end of the search. Overall, on the CEC2014 benchmarks our L-SHADE is highly competitive with NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES and iCMAES-ILS which is the the state-of-the-art restart CMA-ES variants.

From the results of specific subclasses of problems in the CEC2014 benchmark set (Figure 1(b) ~ (e)), L-SHADE is outperformed by the compared methods on the unimodal, multimodal and Composition functions. However, on the 6 hybrid functions (Figure 1(d)), L-SHADE clearly outperforms NBIPOP-<sub>A</sub>CMA-ES and iCMAES-ILS. The hybrid functions are the real-world like problems and have a variable with different properties. This results indicate that L-SHADE is able to outperform state-of-the-art restart CMA-ES variants on real-world problem which variables in the solution vector might have nonuniform features.

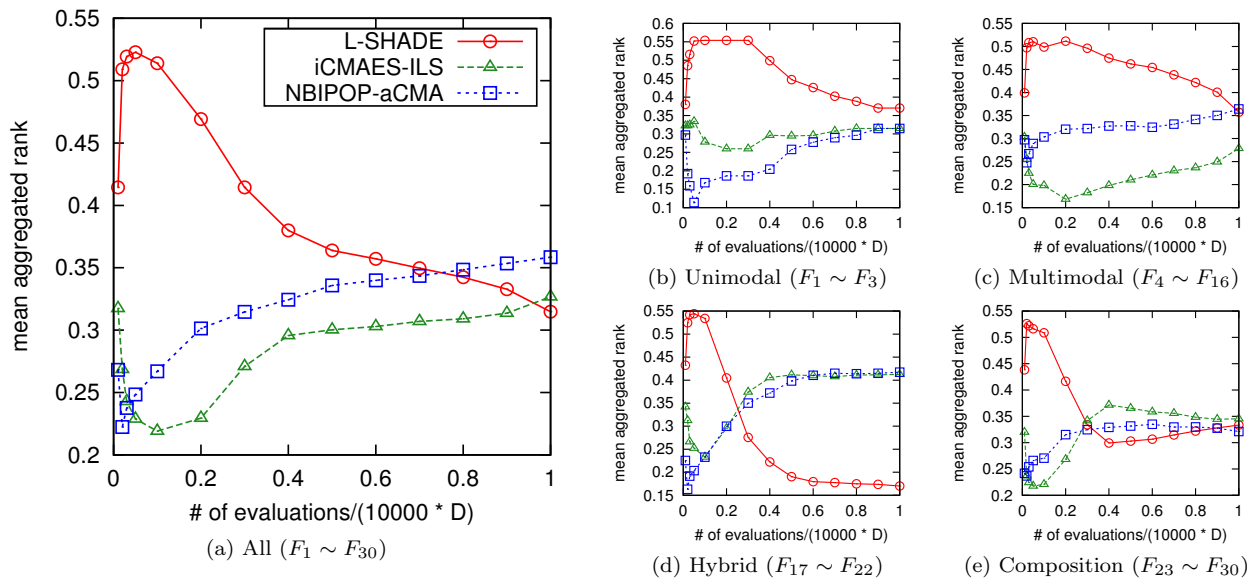


Fig. 1: Comparison of L-SHADE with NBIPOP-aCMA-ES and iCMAES-ILS on the CEC2014 benchmarks for  $D \in \{10, 30, 50, 100\}$  dimensions on all 30 functions (a) and 4 groups (b, c, d, e). The horizontal axis represents the number of objective function calls divided by the maximum number of objective function calls ( $D \times 10,000$ ) and the vertical axis represents the the normalized mean aggregated rank (lower than better).

## 4 Conclusion

This paper proposes L-SHADE [12], which extends SHADE [11] with a Linear Population Size Reduction (LPSR). LPSR is a simplified, special case of Simple Variable Population Sizing [4] which reduces the population linearly, and only requires initial population sizes as user-defined parameter. We compared L-SHADE with NBIPOP-aCMA-ES [8] and iCMAES-ILS [6] which are state-of-the-art restart CMA-ES [1] variants and co-winners of the CEC 2013 competition on real-parameter single objective Optimization. The experimental results on the 30 benchmark functions from the CEC2014 benchmarks [5] show that our L-SHADE is highly competitive with these CMA-ES variants, especially, on the hybrid functions  $F_{17} \sim F_{22}$ . This results are contrary to the current conventional wisdom: “Restart CMA-ES is the state-of-the-art methods for single objective, real parameter optimization problems”.

However, as shown in Figure 1, while the performance of L-SHADE is better than restart CMA-ES variants at the end of the search, L-SHADE is outperformed by them at the early phase of the search. This means that an anytime performance of L-SHADE might be worse than restart CMA-ES variants as well as the other DE algorithms including SHADE without LPSR. Since in practice high quality best-so-far solutions are requested at some a priori unknown time, improving the anytime performance of L-SHADE is an important direction for future work.

## 参考文献

- 1) A. Auger and N. Hansen. A Restart CMA Evolution Strategy With Increasing Population Size. In *IEEE CEC*, pages 1769–1776, 2005.
- 2) J. Brest and M. S. Maučec. Population size reduction

- for the differential evolution algorithm. *Appl. Intell.*, 29(3):228–247, 2008.
- 3) F. Hutter, H. H. Hoos, K. Leyton-Brown, and T. Stützle. ParamILS: An Automatic Algorithm Configuration Framework. *J. Artif. Intell. Res. (JAIR)*, 36:267–306, 2009.
- 4) J. L. J. Laredo, C. Fernandes, J. J. M. Guervós, and C. Gagné. Improving Genetic Algorithms Performance via Deterministic Population Shrinkage. In *GECCO*, pages 819–826, 2009.
- 5) J. J. Liang, B. Y. Qu, and P. N. Suganthan. Problem Definitions and Evaluation Criteria for the CEC 2014 Special Session and Competition on Single Objective Real-Parameter Numerical Optimization. Technical report, Zhengzhou University and Nanyang Technological University, 2013.
- 6) T. Liao and T. Stützle. Benchmark Results for a Simple Hybrid Algorithm on the CEC 2013 Benchmark Set for Real-parameter Optimization. In *IEEE CEC*, pages 1938–1944, 2013.
- 7) F. G. Lobo and C. F. Lima. A Review of Adaptive Population Sizing Schemes in Genetic Algorithms. In *GECCO*, pages 228–234, 2005.
- 8) I. Loshchilov. CMA-ES with Restarts for Solving CEC 2013 Benchmark Problems. In *IEEE CEC*, pages 369–376, 2013.
- 9) R. Storn and K. Price. Differential Evolution - A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces. *J. Global Optimiz.*, 11(4):341–359, 1997.
- 10) P. N. Suganthan. [http://www.ntu.edu.sg/home/EP-NSugan/index\\_files/CEC2013/CEC2013.htm](http://www.ntu.edu.sg/home/EP-NSugan/index_files/CEC2013/CEC2013.htm), 2013.
- 11) R. Tanabe and A. Fukunaga. Success-History Based Parameter Adaptation for Differential Evolution. In *IEEE CEC*, pages 71–78, 2013.
- 12) R. Tanabe and A. Fukunaga. Improving the Search Performance of SHADE Using Linear Population Size Reduction. In *IEEE CEC*, available at <https://sites.google.com/site/tanaberyoji/>, 2014.
- 13) J. Zhang and A. C. Sanderson. JADE: Adaptive Differential Evolution With Optional External Archive. *IEEE Tran. Evol. Comput.*, 13(5):945–958, 2009.

# 回転不変性を考慮した超球交叉による Differential Evolution の改良

○金政実 相吉 英太郎 (慶應義塾大学)

## Improvement on Differential Evolution by proposing rotation invariant hypersphere crossover

\*M. Kanemasa and E. Aiyoshi (Keio University)

**Abstract**— Crossover is one of the most known nature inspired operations in heuristic optimization algorithms. It was traditionally inspired by the evolution of species. The DNA sequences could be regarded as a long integer vector, and evolution corresponds to finding better blueprint for the fitness landscape, surviving. However, at some point, researchers started using them for optimizing real valued vector, which is apart from the original philosophy. In this paper, we consider the invariance of crossover operation, and propose new crossover operation that supports rotational invariance. However, this new operation is not invariant to the scaling of coordinate system, therefore, we use parameter to compensate for the problem. We evaluate and compare our proposal with uniform crossover, using Differential Evolution as the base algorithm to verify that the proposed method is worth considering and useful.

**Key Words:** Crossover, Hypersphere crossover, Heuristic algorithm, Differential Evolution, Invariance

### 1 はじめに

最適化手法を実際の最適化問題に適用するとき課題になることは、アルゴリズムの選定である。しかし、ヒューリスティック最適化手法においては、アルゴリズムの更新式が数理的な根拠によって導出されたものではなく、特定のベンチマークにおける性能指針が、実際に解きたい問題の解の良さにどの程度影響を与えるかの理論的な根拠に基づく指針を与えることは不可能である。しかも、Particle Swarm Optimization (PSO)<sup>1)</sup>や Differential Evolution (DE)<sup>2)</sup>などの多点型のヒューリスティック最適化手法の場合には、複数の探索点間の情報交換による結合系として、大域的最適化性能などの優秀な性能が創発されるため、そのアルゴリズムの理論的解析を難しくしている。また、これらのアルゴリズムは変数間に干渉がない目的関数をもつベンチマーク問題には良い結果を出す操作が含まれており、この目的関数の座標軸を回転させて変数間に干渉を持たせた問題では元の問題と比べて劣る結果が得られている。これは、アルゴリズムが、座標軸の回転に対してその探索能力がロバストでないためと考えられる。

そこで、近年においてはアルゴリズムのベンチマークに対する性能だけでなく、目的関数に数学的に単純な変換を行ったとしても、アルゴリズムの性能が変わらない、もしくはあまり影響を受けない更新式を作るべきであるという設計指針が出てきている。とくに、近年有名なCMA-ES<sup>3)</sup>がアルゴリズムの不変性に重みを置いたパラメータ調整機構と更新式を備えている。一方で一般的な交叉、一様交叉などは回転に不変的な操作ではなく、結果としてDEにおいて回転させた問題と、元の問題で性能が異なるという原因になっている。

ところで、実数空間上の二つの探索点に対する交叉演算によって生成される新点は、その2点を直径とする超球上に生成されることが容易に確認される。そこで本論文では、この性質を一般化することで、その2点の中心を中心とする超球面上の新点を生成する「超球交叉」を提案し、回転操作に不変的な実数空間上の交叉を提案する。具体的には、二つの探索点の中心を中心とした超球面上の乱数ベクトルを発生させ、それ

を新点とする。

本論文では、元となるアルゴリズムとしてDEを使用し、今回提案する超球交叉と、一般的な一様交叉における性能を比較する。

### 2 DE

DEは、1995年にPriceとStornによって提案された目的関数の勾配情報を必要としないヒューリスティックな実数値最適化アルゴリズムの一種で、無制約最適化問題

$$\underset{\mathbf{x}}{\text{minimize}} \quad E(\mathbf{x}) \quad (1)$$

の大域的最適解を比較的効率よく求めることができる手法として近年評価されている。DEのアルゴリズムの特徴は、まず多点探索法であり、第 $k$ イテレーションにおいて、それら複数の探索点中の更新したい一つの探索点を親個体として、 $m$ 個体目を $\mathbf{x}^m(k)$ とすると、互いに異なる複数の探索点 $\mathbf{x}^{r1}(k), \mathbf{x}^{r2}(k), \mathbf{x}^{r3}(k)$ を用いた差分情報から、親個体の変異ベクトル $\mathbf{v}^m(k)$ をまず生成する。親個体の変異ベクトル $\mathbf{v}^m(k)$ を生成するための更新式は、単純なものから比較的複雑なものまで、多くの種類が提案されており、その代表的な例として下記がある。

$$\mathbf{v}^m(k+1) = \mathbf{x}^{r1}(k) + F(\mathbf{x}^{r2}(k) - \mathbf{x}^{r3}(k)) \quad (2)$$

なお、 $F$ は正の値を取るパラメータで、成分に共通である。つぎにこれに遺伝アルゴリズムと同様の交叉の演算を施して試験ベクトル $\mathbf{u}^m(k)$ を生成する。交叉は様々な種類が提案されているが、有名なもので一様交叉というものがある。具体的には交叉確率 $C_r$ を設定し、一様乱数を用いた次の式で子を生成する手法である。

$$u_i^m(k) = \begin{cases} v_i^m(k), & \text{if } \text{rand}_i^m() < C_r \\ x_i^m(k), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (3)$$

試験ベクトルの生成を終えたら、それを評価し、次の式で、親個体 $\mathbf{x}^m(k+1)$ を更新する。

$$\mathbf{x}^m(k+1) = \begin{cases} \mathbf{u}^m(k), & \text{if } E(\mathbf{u}^m(k)) < E(\mathbf{x}^m(k)) \\ \mathbf{x}^m(k), & \text{otherwise} \end{cases} \quad (4)$$



本論文では、探索点の個体、またイテレーションを世代と称することにする。

### 3 超球交叉

まず、一般的な一様交叉が、目的関数の座標系の平行移動操作に対しては不変的であるが、回転操作に対して不変的でないことを示す。一様交叉は、 $M_1 + M_2 = 1$  を満たす 0 または 1 のみを成分とする 2 つの対角行列  $M_1, M_2$  を用いて、

$$u = M_1 x_1 + M_2 x_2 = M_1(x_1 - x_2) + x_2 \quad (5)$$

と表すことができる。したがって、座標系における  $a$  の分の平行移動に対して、

$$\begin{aligned} u' &= M_1((x_1 - a) - (x_2 - a)) + (x_2 - a) \\ &= M_1(x_1 - x_2) + x_2 - a = u - a \end{aligned} \quad (6)$$

が成り立ち、平行移動してから交叉しても、交叉してから平行移動してもその座標の値は不変である。これに対して座標系の回転操作  $R$  に対しては、

$$\begin{aligned} u' &= M_1 R(x_1 - x_2) + R x_2 \\ &= R M_1(x_1 - x_2) + x_2 = R u \end{aligned} \quad (7)$$

であり、回転してからの交叉と交叉してからの回転は一致せず、一様交叉は回転操作に対して不変的ではないことがわかる。ところで、(7) 式より

$$R^{-1} u' = R^{-1} M_1 R(x_1 - x_2) + x_2 \quad (8)$$

の意味を考えてみると、回転してからの交叉は、まず、 $x_2$  から  $x_1$  へのベクトルを回転させ、つぎにランダムな座標軸成分だけ残し、最後にベクトルの始点が  $x_2$  に戻るように逆回転させている。結果的に生成されるのは  $(x_1 + x_2)/2$  を中心とした半径が  $\|(x_1 - x_2)/2\|$  超球面上に位置する点となる。したがって、超球面上に移動するような交叉を考えると、超球面上に束縛されているという意味で不変とみなすと、回転操作に不変的であるといえる。そこで本論文では、「親」として 2 点  $x^1, x^2$  を選び、中心が  $(x_1 + x_2)/2$ 、半径が  $\|(x_1 - x_2)/2\|$  の超球面上に一様な乱数を生成し、それを「子」とする交叉を提案し、「超球交叉」と称することにする。なお、単位超球面上の一様な乱数の生成は、 $N$  次元の正規分布乱数を生成した後、それを正規化することで生成することができる<sup>4)</sup>。このように生成される単位超球面上の乱数を  $S()$  とすると、超球交叉は、

$$u = \|(x_1 - x_2)/2\| S() + (x_1 + x_2)/2 \quad (9)$$

と表すことができる。座標系の回転操作を施した後に超球交叉を行うと、

$$\begin{aligned} u' &= \|R(x_1 - x_2)/2\| S() + R(x_1 + x_2)/2 \\ &= \|(x_1 - x_2)/2\| S() + R(x_1 + x_2)/2 \end{aligned} \quad (10)$$

となるのに対して、超球交叉を行ってから座標系の回転操作を施すと、

$$u'' = \|(x_1 - x_2)/2\| RS() + R(x_1 + x_2)/2 \quad (11)$$

となるが、 $RS()$  が単位超球面上の乱数になるという意味で  $u' = u''$  と見做すことができ、超球交叉は座標系の回転に不変的といえる。

つぎに、座標系の軸方向のスケールに関する不変性について考える。座標軸のスケール変換を表す対角行列を  $A$  とすると、座標軸のスケール変換を施してからの一様交叉は、対角行列の積について  $M_1 A = A M_1$  が成り立つことから、

$$\begin{aligned} u' &= M_1 A(x_1 - x_2) + A x_2 \\ A M_1(x_1 - x_2) + A x_2 &= A u \end{aligned} \quad (12)$$

となり、座標系の軸方向のスケール変換に関して不変的であることがわかる。これに対して、超球交叉に関しては、

$$\begin{aligned} u' &= \|A(x_1 - x_2)/2\| S() + A(x_1 + x_2)/2 \\ &= \|(x_1 - x_2)/2\| AS() + A(x_1 + x_2)/2 = A u \end{aligned} \quad (13)$$

となり、乱数の位置する超球面の半径が軸方向にスケール変換されるため、軸方向のスケール変換に関しては不変的ではない。

本論文では、軸方向のスケール変換に関する超球交叉の普遍性の欠如を補償するために、超球の半径の調整機能を超球交叉に付与するものとする。このために、超球面の半径を調整するパラメータ  $\sigma$  を導入すると、超球交叉は

$$u = \sigma \|(x_1 - x_2)/2\| S() + (x_1 + x_2)/2 \quad (14)$$

と表される。ここで、調整パラメータ  $\sigma$  に関しては、一定値とした場合と、DE の探索点の更新状況、とくに交叉によって生成される試験点の更新状況により、このパラメータ値を調整する場合を考える。たとえば、探索点  $m$  の位置が、超球交叉によって第  $k$  イテレーションから遡った一定イテレーション期間中更新された割合  $p_s^m(k)$  を用いて、全探索点の平均

$$p_s(k) = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M p_s^m(k) \quad (15)$$

を計算し、

$$\sigma(p_s) = c + a p_s, (c > 0, a > 0) \quad (16)$$

とすることが考えられる。探索点全体が超球交叉によって平均的によく更新される場合は、大域的な探索のために大きな超球半径で交叉し、そうでない場合は、より小さい超球半径で局所的な探索をおこなうという調整則である。

### 4 シミュレーション

実数型遺伝的アルゴリズム等の最適化アルゴリズムも交叉を用いるが、親の選択など、様々な設定や条件に性能が左右されるため、本論文では元となるアルゴリズムとして DE を使用し、従来の一様交叉との性能を比較する。また、便宜上、今回の超球交叉を用いた DE を DS と表記することにし、パラメータ調整機構を備えた DS を DSP と表記することにする。他手法の比較として、グラムシュミット直交化を用いて回転不変性を

持たせた DE(RIDE)<sup>5)</sup> も同時にシミュレーションする。これに関しては、もとの論文では通常の交叉と直交座標を用いた交叉の両方を交互に使っているが、本研究では交叉としての性能を見るため、直交座標を用いた交叉のみを行う。アルゴリズムの実行とその評価については、すべてのシミュレーションで共通に、変数の次元数が 50 のベンチマークを最大ファンクションコール数 20,000 で解く。RIDE の個体数は直交座標を作る必要があるため  $M = 50$  とするが、その他のアルゴリズムは個体数  $M = 20$  で固定する。それぞれのアルゴリズムについて 9 種類の異なるパラメータのもとで問題を解く。DE の場合は  $F = 0.5, 0.7, 0.9$  と  $C_r = 0.5, 0.7, 0.9$  の組み合わせの 9 通り、DS の場合は  $F = 0.5, 0.7, 0.9$  と  $\sigma = 0.5, 0.7, 0.9$  の組み合わせの 9 通り、DSP は  $F = 0.5$  は固定し、 $c = 0.75, 1.00, 1.25$  と  $a = 0.25, 0.50, 0.75$  の組み合わせの 9 通り、RIDE の場合は  $F = 0.5, 0.7, 0.9$  と  $C_r = 0.5, 0.7, 0.9$  の組み合わせの 9 通りのシミュレーションを行う。

なお、目的関数  $E$  として、 $2^N$ -minima 関数、Rosenbrock 関数、Alpine 関数、Rastrigin 関数、Levy 関数を用いた問題を使用する。これらのベンチマークの目的関数は、制約条件が暗黙的に  $-5 < x_i < +5$  に設定されているが、この制約をすべて  $0 < x_i < 1$  にリスケールする。また、最適解の位置をリスケールした後に  $0 \leq x_i \leq 1$  の範囲で最適解の成分を均一に分散させる。たとえば、変数次元 5 の問題では  $\mathbf{x}^{\text{opt}} = (0.0, 0.25, 0.5, 0.75, 1.0)^T$  が最適解となる様に平行移動を行う。これらの制約条件についてはトーラス化による緩和を行う。具体的には、変異ベクトルに関してはトーラス化の操作は行わないが、試験ベクトルに関してはトーラス化を行い、生成される点を制約条件内に引き戻す操作を行う。また、 $p_s(k)$  については、過去  $10 \times N$  イタレーションまで遡った値を使用することにする。

試行回数は 100 回とし、それぞれの設定/アルゴリズムの標本の中央値と、それをもとにしたアルゴリズム間の順位を計算する。それぞれのアルゴリズムにおいて全般的に良かった設定を、順位合計値をヒューリスティックな評価基準とし、選ぶ。選び出された 4 つのアルゴリズムについてはペアで順位併合を行い、その順位に対して Welch の t 検定を実行する。有意水準は、各目的関数ごとに結果が 99.9% で成立するように、Bonferroni 法を用いて補正する。今回は目的関数ごとにアルゴリズムが 4 種類あり、その組み合わせを考慮するので、有意水準を  $0.1\%/4C_2$  と補正する。検定の方法に関しては文献 (6) を参考にした。

## 5 結果と考察

各種のアルゴリズムをいくつかのパラメータ設定で実行した結果、得られた目的関数値の 100 回試行の中央値は Table 1, その順位は Table 2 になった。表で  $2^N$  とあるのは  $2^N$ -minima, Alp. は Alpine, Lev. は Levy, Rast. は Rastrigin, Ros. は Rosenbrock の略称である。Table 2 の順位は標本の中央値をもとにした順位で、同じ値の場合は、順位平均となっている。たとえば Table 2 の  $2^N$  の列だと 3 位が 5 個あるが、同着 1 位が 5 つあり、 $(1+2+3+4+5)/5 = 3.0$  となっている。DE はパラメータの設定が正しければ、どの問題でも良い結果を出す

Table 1: Median of algorithms with 20,000 function calls

	$2^N$	Alp.	Lev.	Rast.	Ros.
DE $F = 0.5, C_r = 0.5$	-3916.6	73.0	36.3	449.6	80.9
DE $F = 0.5, C_r = 0.7$	-3914.9	49.1	28.2	430.1	134.2
DE $F = 0.5, C_r = 0.9$	-3640.0	13.3	15.0	197.5	3076.3
DE $F = 0.7, C_r = 0.5$	-2199.8	94.5	77.1	554.9	10319.4
DE $F = 0.7, C_r = 0.7$	-3121.8	96.1	76.7	540.6	4511.7
DE $F = 0.7, C_r = 0.9$	-3875.5	57.9	35.9	470.7	480.4
DE $F = 0.9, C_r = 0.5$	1843.3	97.8	101.2	638.3	119372.5
DE $F = 0.9, C_r = 0.7$	2667.2	102.7	113.2	670.8	134169.5
DE $F = 0.9, C_r = 0.9$	-3226.7	99.2	62.3	514.6	6107.6
DSP $a = 1.0, c = 0.25$	-421.6	34.0	69.5	393.8	23244.1
DSP $a = 1.0, c = 0.50$	-3506.6	21.7	26.1	267.2	271.2
DSP $a = 1.0, c = 0.75$	-3916.6	34.6	24.9	403.8	78.5
DSP $a = 1.25, c = 0.25$	-1961.6	32.0	58.0	362.5	7638.7
DSP $a = 1.25, c = 0.50$	-3829.8	20.7	23.7	274.6	110.2
DSP $a = 1.25, c = 0.75$	-3916.6	33.0	25.8	401.4	77.7
DSP $a = 0.75, c = 0.25$	2263.1	35.6	104.8	417.6	67364.6
DSP $a = 0.75, c = 0.50$	-2830.4	22.7	32.7	277.1	3348.6
DSP $a = 0.75, c = 0.75$	-3916.6	32.0	25.4	402.5	80.0
DS $F = 0.5, \sigma = 0.5$	8909.9	31.6	133.6	457.4	267536.0
DS $F = 0.5, \sigma = 0.7$	-1691.8	18.3	34.7	423.2	21444.2
DS $F = 0.5, \sigma = 0.9$	-3916.6	49.8	39.6	424.0	81.8
DS $F = 0.7, \sigma = 0.5$	506.4	19.2	43.7	322.7	58122.9
DS $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-3916.6	42.7	28.9	414.8	268.7
DS $F = 0.7, \sigma = 0.9$	180.7	83.3	107.8	554.7	2801.1
DS $F = 0.9, \sigma = 0.5$	-3719.4	34.9	31.6	435.7	1558.9
DS $F = 0.9, \sigma = 0.7$	-3911.9	74.5	86.2	484.7	115.4
DS $F = 0.9, \sigma = 0.9$	8519.8	97.9	148.4	689.7	210484.0
RIDE $F = 0.5, C_r = 0.5$	-3781.5	30.5	25.9	402.1	343.6
RIDE $F = 0.5, C_r = 0.7$	-3496.9	17.7	26.1	339.8	1163.3
RIDE $F = 0.5, C_r = 0.9$	-523.7	37.3	36.8	312.3	27493.0
RIDE $F = 0.7, C_r = 0.5$	-3823.0	32.3	25.0	404.7	271.7
RIDE $F = 0.7, C_r = 0.7$	-3597.9	19.0	25.8	381.8	755.4
RIDE $F = 0.7, C_r = 0.9$	-1333.2	31.4	35.8	289.0	22873.3
RIDE $F = 0.9, C_r = 0.5$	-3850.9	34.4	26.7	405.4	213.1
RIDE $F = 0.9, C_r = 0.7$	-3678.6	24.1	27.3	387.3	507.1
RIDE $F = 0.9, C_r = 0.9$	-1773.5	28.3	37.4	274.8	16567.6

が、その他の問題の結果が悪くなっていることが確認される。たとえば、 $F = 0.5, C_r = 0.9$  においては Alpine, Levy, Rastrigin で 1 位となっているが、 $2^N$ -minima 関数は 16 位、Rosenbrock 関数は 20 位となっている。また、 $2^N$ -minima 関数の性能が同着 1 位の 3.0 となっているパラメータ  $F = 0.5, C_r = 0.5$  においては Rosenbrock 関数も 4 位と改善されているが、Alpine, Levy, Rastrigin で悪い順位となっている。標本の中央値の順位から判断すると、RIDE と DS は特筆する点がなく、DE と比較して良い結果とはなっていない。RIDE に関しては元のアルゴリズムでは通常の交叉方法と組み合わせで使っていることと、個体数の調整によってより良い結果が出ると考えられる。DS に関しては、パラメータ調整機構を持たせた DSP が  $a = 1.25, c = 0.5$  のパラメータにおいて、複数の目的関数においてバランス良く結果を出していることが確認できる。

それぞれのアルゴリズムにおいて全体的に良かったパラメータは、順位合計値をヒューリスティックな評価基準とすると、DE は  $F = 0.5, C_r = 0.9$  が順位合計値が 39 で全般的に良く、同様に DSP は  $a = 1.25, c = 0.5$  の順位合計値が 28, DS は  $F = 0.7, \sigma = 0.7$  の順位合計値が 74, RIDE は  $F = 0.5, C_r = 0.7$  の順位合計値が 54 となっている。

これら 4 つの四分位数範囲を図にしたものが Fig. 1 ~5 となる。参考までに、黒い点で標本平均も示した。箱の中央の赤い線が中央値、箱の上が 75% 点、箱の下が 25% 点、箱から伸びている線の先端は、箱の範囲を 1.5 倍し、その範囲に含まれる最大、もしくは最小の点

Table 2: Rank of algorithms with 20,000 function calls

	$2^N$	Alp.	Lev.	Rast.	Ros.	sum	max
DE $F = 0.5, C_r = 0.5$	3	28	20	26	4	81	28
DE $F = 0.5, C_r = 0.7$	7	25	13	24	8	77	25
DE $F = 0.5, C_r = 0.9$	16	1	1	1	20	39	20
DE $F = 0.7, C_r = 0.5$	23	31	29	33	25	141	33
DE $F = 0.7, C_r = 0.7$	21	32	28	31	22	134	32
DE $F = 0.7, C_r = 0.9$	9	27	19	28	14	97	28
DE $F = 0.9, C_r = 0.5$	32	33	31	34	33	163	34
DE $F = 0.9, C_r = 0.7$	34	36	34	35	34	173	36
DE $F = 0.9, C_r = 0.9$	20	35	26	30	23	134	35
DSP $a = 1.0, c = 0.25$	29	18	27	13	29	116	29
DSP $a = 1.0, c = 0.50$	18	7	9	2	11	47	18
DSP $a = 1.0, c = 0.75$	3	20	3	17	2	45	20
DSP $a = 1.25, c = 0.25$	24	14	25	10	24	97	25
DSP $a = 1.25, c = 0.50$	11	6	2	3	6	28	11
DSP $a = 1.25, c = 0.75$	3	17	7	14	1	42	17
DSP $a = 0.75, c = 0.25$	33	22	32	21	32	140	33
DSP $a = 0.75, c = 0.50$	22	8	16	5	21	72	22
DSP $a = 0.75, c = 0.75$	3	15	5	16	3	42	16
DS $F = 0.5, \sigma = 0.5$	36	13	35	27	36	147	36
DS $F = 0.5, \sigma = 0.7$	26	3	17	22	27	95	27
DS $F = 0.5, \sigma = 0.9$	3	26	23	23	5	80	26
DS $F = 0.7, \sigma = 0.5$	31	5	24	8	31	99	31
DS $F = 0.7, \sigma = 0.7$	6	24	14	20	10	74	24
DS $F = 0.7, \sigma = 0.9$	30	30	33	32	19	144	33
DS $F = 0.9, \sigma = 0.5$	14	21	15	25	18	93	25
DS $F = 0.9, \sigma = 0.7$	8	29	30	29	7	103	30
DS $F = 0.9, \sigma = 0.9$	35	34	36	36	35	176	36
RIDE $F = 0.5, C_r = 0.5$	13	11	8	15	13	60	15
RIDE $F = 0.5, C_r = 0.7$	19	2	10	9	17	57	19
RIDE $F = 0.5, C_r = 0.9$	28	23	21	7	30	109	30
RIDE $F = 0.7, C_r = 0.5$	12	16	4	18	12	62	18
RIDE $F = 0.7, C_r = 0.7$	17	4	6	11	16	54	17
RIDE $F = 0.7, C_r = 0.9$	27	12	18	6	28	91	28
RIDE $F = 0.9, C_r = 0.5$	10	19	11	19	9	68	19
RIDE $F = 0.9, C_r = 0.7$	15	9	12	12	15	63	15
RIDE $F = 0.9, C_r = 0.9$	25	10	22	4	26	87	26

Table 3: Pairwise ranked Welch's t-test on four algorithms for 50 dimensional Rotated  $2^N$ -minima func. with 20,000 function calls

alg1	alg2	t-value	P-value
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	9.20	5.66e-17
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	22.05	3.49e-55
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-2.59	1.02e-02
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	3.78	2.16e-04
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-11.47	1.21e-23
DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-23.80	6.36e-60

である。それが標本の最大、もしくは最小でない場合は、その範囲を超えたデータをプロットしてある。

表の結果をもとに、この4つのアルゴリズムをペアで順位併合を行い、Welchのt検定をした結果がTable 3~7となる。シミュレーションの節でも書いたが、有意水準は目的関数ごとに0.1%で、6ペアの比較を行うので、Bonferroni法を用いて有意水準を0.1%/6に補正する。これによって有意差が認められたものに関しては、 $\gamma$ 過誤の可能性は無視できるとし、P-valueが0.001/6より小さく、t-valueの符号が負なら左、正なら右のアルゴリズムの方が優れており、良い方のアルゴリズムのマスに灰色にした。同じ表で、同じアルゴリズムのマスが3回灰色になっていれば、他の手法と比べて全て優秀な結果が出ていることになる。DEはAlpine, Levy, Rastriginにおいて他のアルゴリズム勝っている。パラメータ調整型のDSPはRosenbrock関数において他のアルゴリズムに勝っており、 $2^N$ -minima関数においてはパラメータ調整のない超球交叉に対してのみ、有意差が認められない結果となっている。

Table 4: Pairwise ranked Welch's t-test on four algorithms for 50 dimensional Rotated Alpine func. with 20,000 function calls

alg1	alg2	t-value	P-value
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	-17.93	2.40e-43
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-24.37	1.61e-61
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-5.76	3.81e-08
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-24.37	1.61e-61
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	1.41	1.60e-01
DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	16.33	4.67e-38

Table 5: Pairwise ranked Welch's t-test on four algorithms for 50 dimensional Rotated Levy func. with 20,000 function calls

alg1	alg2	t-value	P-value
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	-16.10	2.44e-37
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-20.01	5.61e-49
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-15.32	2.01e-35
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-7.84	2.91e-13
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-2.34	2.02e-02
DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	4.54	9.70e-06

Table 6: Pairwise ranked Welch's t-test on four algorithms for 50 dimensional Rotated Rastrigin func. with 20,000 function calls

alg1	alg2	t-value	P-value
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	-4.74	4.69e-06
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-10.52	7.19e-20
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-7.23	1.62e-11
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-20.00	5.03e-49
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-9.55	5.39e-18
DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	13.21	6.53e-29

Table 7: Pairwise ranked Welch's t-test on four algorithms for 50 dimensional Rotated Rosenbrock func. with 20,000 function calls

alg1	alg2	t-value	P-value
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	24.37	1.61e-61
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	24.37	1.61e-61
DE, $F = 0.5, C_r = 0.9$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	17.36	1.32e-41
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	-20.64	3.20e-51
DSP, $a = 1.25, C_r = 0.50$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-24.37	1.61e-61
DS, $F = 0.7, \sigma = 0.7$	RIDE, $F = 0.7, C_r = 0.7$	-18.43	7.95e-45

以上の結果からDEとDSPを比較する。DEのパラメータの一つである $C_r$ の意味は、一様交叉の場合、毎回平均して遺伝子の $C_r$ の割合の要素を交叉において交換するというものである。このことから、問題の次元数や、問題に大きく依存するパラメータになっている。多様な問題に対するロバスト性の観点からは悪い特徴だが、特化することにより良い結果を出すことができるという見方もある。このことはTable 2の1行目と3行目より確認できる。一方、DSにおいてはその $C_r$ のパラメータがなくなり、前述の一様交叉の問題点はなくなったが、逆に特定の問題に特化した性能が失われたと考えられる。

パラメータ調整則について考察すると、今回用いたフィードバック型パラメータ調整機構をそなえた超球交叉を用いたDEは、単純な超球交叉よりも全般的な性能が良くなるのがTable 2と検定結果より確認できる。今回の(16)式のパラメータ調整則は群の更新確率が悪ければ半径を減らす、つまり収束傾向に向かい、更新確率が高ければ半径を増やす、つまり発散傾向を増やすという調整則になっている。そのため、局所探索的なルールとなっている。

## 6 終わりに

本論文では、交叉の不変性に着目し、超球交叉を提案し、その性能をDEを用いて確かめ、一様交叉やRIDEの交叉と比較し、有用性を確かめた。今回の論文の結果、 $\sigma(p_s) = 0.5 + 1.25p_s$  が全般的に良い結果を出すパラメータであることを確認し、フィードバック型パラメータ調整則を採用することにより、全般的に良い性能を達成できると確認できた。今後の課題として、最大イタレーション数、個体数、次元数に対するパラメータ調整則のロバスト性の検証、もしくはそれらに対してもロバストな調整則の設計が考えられる。

### 参考文献

- 1) J. Kennedy and R. C. Eberhart: "Particle swarm optimization", *Proc. of IEEE Int. Conf. Neural Networks*, pp. 1942-1948 (1995)
- 2) R. Storn and K. Price, "Differential Evolution - A simple and efficient adaptive scheme for global optimization over continuous spaces", In *Journal of Global Optimization*, Vol. 11, No.4, pp. 341-359 (1997)
- 3) A. Ostermeier, A. Gawelczyk and N. Hansen: "A Derandomized Approach to Self-Adaptation of Evolution Strategies", *Journal of Evolutionary Computation*, Vol.2, No. 4, pp. 369-380 (1994)
- 4) G. Marsaglia: "Choosing a Point from the Surface of a Sphere", In *Annals of Mathematical Statistics*, Vol. 43, No. 2, pp.64-646 (1972)
- 5) T. Takahama and S. Sakai: "Solving nonlinear optimization problems by Differential Evolution with a rotation-invariant crossover operation using Gram-Schmidt process", *Proc. of Nature and Biologically Inspired Computing (NaBIC 2010)*, pp.526-533 (2010)
- 6) M. Wineberg and S. Christensen: "Statistical analysis for evolutionary computation: advanced techniques", *Proc. of the 12th annual conference companion on Genetic and evolutionary computation*, pp. 2661-2682 (2010)

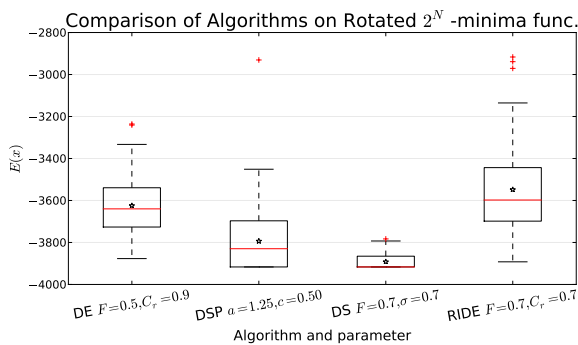


Fig. 1: Interquartile range of objective function value on  $2^N$ -minima func.

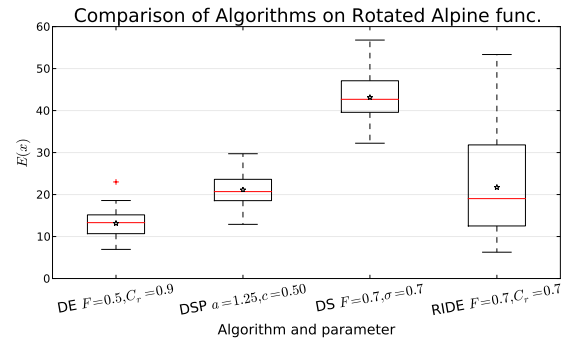


Fig. 2: Interquartile range of objective function value on Alpine func.

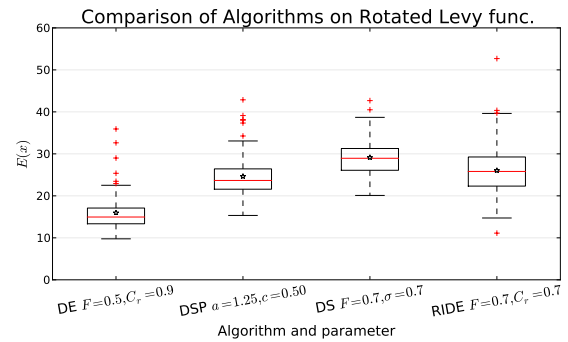


Fig. 3: Interquartile range of objective function value on Levy func.

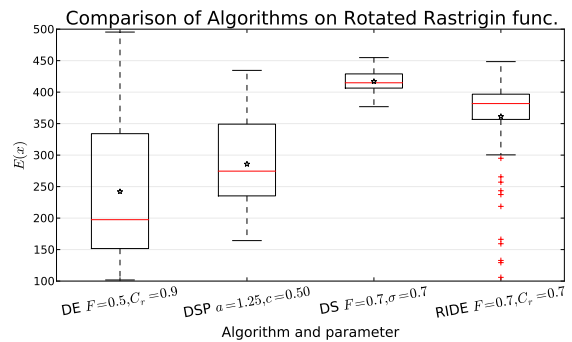


Fig. 4: Interquartile range of objective function value on Rastrigin func.

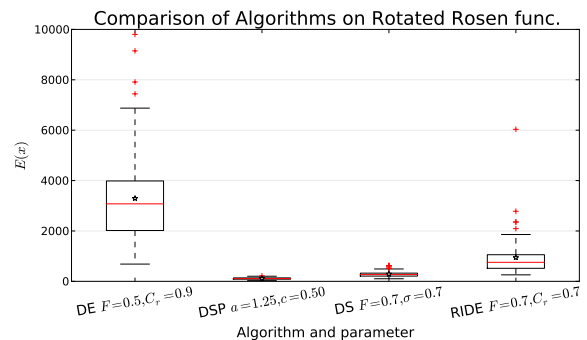


Fig. 5: Interquartile range of objective function value on Rosenbrock func.

# 離散最適化向け進化計算手法 Re-labeling Differential Evolution の少個体時探索能力に関する考察

船木亮平 高野浩貴 村田純一（九州大学）

## A Study on Performance of the Small Population Search by Re-labeling Differential Evolution for Combinatorial Optimization

\*R. Funaki, H. Takano and J. Murata (Kyushu University)

**Abstract**— Authors proposed a new differential evolution (DE) technique called Re-labeling Differential Evolution for combinatorial optimization. In combinatorial optimization problems, individuals are set of integer values. However, these integer values (indices) are used to identify several different things, and therefore irrelevant to features such as larger or smaller. In the case that DE solves combinatorial optimization problems, indices which are assigned randomly affect DE performance because DE algorithm includes basic arithmetic operations. Re-labeling DE re-assigns indices in order to give indices numerical features. DE operations with difference vectors between individuals can find better solutions, therefore DE provides high performance even under the conditions of small population searches. This paper shows that Re-labeling DE can solve combinatorial problems efficiently under the condition of small population. Re-labeling DE is compared with genetic algorithms in the performance when applied to route selection problems and traveling salesman problems.

**Key Words:** Interactive Evolutionary Computation, Differential Evolution, Combinatorial Optimization, TSP

### 1 はじめに

ユーザの反復評価を通して最適化を行う対話型進化計算では、ユーザの感性に基づく価値判断が必要な対象の最適化を行うことができ、芸術、医療など多岐にわたる分野で応用が期待されている。例えば、Web ページデザインにおいて、ユーザはコンピュータが提示した配色候補を実際に見ながら評価を行うことで色彩調和などのカラーコーディネートの特長知識を持たずともデザインすることができる。更に、医療分野では人工内耳の設定パラメータの調整に対話型進化計算を利用し、装用者の聞こえの特性を解析する試みが行われている<sup>1)</sup>。対話型進化計算はユーザの主観的評価基準を基に最適化を行うため、探索時のユーザ疲労が結果に影響する。そのため、評価におけるユーザ疲労の軽減が大きな課題となっており、コンピュータから提示された候補を評価する際のユーザインターフェイスの改良や、評価の繰り返し回数自体を減らすためにより高性能な進化計算の発案、高速化手法の導入など様々な取り組みが行われている。

対話型差分進化<sup>3)</sup>もその対策の一つである。対話型差分進化ではユーザは対比較評価を行うため、全個体比較を行う対話型遺伝的アルゴリズムよりも疲労軽減が可能である。動画や音声などの同時に比較して評価できない対象を最適化する時、時系列提示された複数の候補を記憶を頼りに比較し評価点を与えることは困難である。このような対象を扱う場合に、対比較評価対話型差分進化の疲労軽減効果は特に大きくなる。さらに、個体間差分ベクトルを用いた効率的な探索によって少個体という条件においても高い探索性能を示しており、満足解に到達するまでの評価回数自体も減らすことができる。

以上の点から、対話型差分進化の研究が盛んに行われている。しかし、差分進化は実数値最適化向けの手法であり、組合せ最適化問題へ適用することができな

い。一方で、前述のウェブページにおける色の組合せ最適化問題や、ある空間において異なる発光スペクトルを持つ複数の照明をどのように配置するかといった順列ベースの組合せ最適化などユーザの主観的評価が必要な組合せ最適化問題は数多く存在する。このような組合せ最適化問題に対話型差分進化を適用することができれば、対比較評価や個体間差分ベクトルによる効率的な探索などの恩恵を受けることができる。

本研究では、筆者らによって提案された離散最適化向け進化計算手法 Re-labeling Differential Evolution<sup>2)</sup>を取り上げ、対話型最適化問題を想定した少個体という条件における探索性能を確認する。そのために、10～50 個体の少個体数で 4 つのテスト問題を用いたシミュレーション実験を行うことで、従来の組合せ最適化手法である遺伝的アルゴリズムと比較し個体数毎の特徴を考察する。

### 2 Differential Evolution

近年、実数値空間での数値最適化手法として差分進化 (Differential Evolution: DE)<sup>4)5)</sup>の研究が盛んに行われている。DE は 2 個体の差分ベクトルを用いることで効果的な探索を実現している。個体が広く分散している探索序盤では個体間の差分ベクトルは大きくなり、探索領域を広く探索する大域的探索を行う。次第に個体が収束してくると差分ベクトルも小さくなり、局所的な探索へと変化していく。このように、DE において大域的探索から局所探索への移行が円滑に行われる。また、差分ベクトルの向きは個体分布形状の傾きの指標となる。目的関数が軸に対して回転した形状をしている場合、個体群もその形状に沿った分布となり、個体間差分ベクトルを用いることで目的関数の形状に合わせた探索を行うことができる。

DE では、1 つの親個体から 1 つの子個体を生成することで二者択一の評価方法を実現している。子個体が親個体よりも優れていれば子個体が次世代に継承され、

親個体が優れていればそのまま親個体が次世代に引き継がれる。ユーザの主観評価を適合度として探索を行う対話型差分進化 (IDE) において、この対比較評価方式はユーザ疲労の軽減に大きく貢献する。特に、動画や音声など同時比較を行えない対象の評価では、ユーザは順次提示された複数の候補を記憶頼りに比較するほかなくユーザにとって大きな負担となる。このような場合、遺伝的アルゴリズム (Genetic Algorithm: GA) のような全個体を比較し各々に評価点を与える評価方法での最適化は非常に困難なものとなる。

以下に DE の演算手順を記す。

1. 個体群を初期化する。
2. target vector を決定する。全個体から順番に選ばれる
3. target vector 以外の個体から 3 個体  $X_{R1}$ ,  $X_{R2}$ ,  $X_{R3}$  をランダムに選択する。
4. 次式より mutant vector  $M$  を生成する。

$$M = X_{R1} + F \times (X_{R2} - X_{R3}) \quad (1)$$

$F$  は 0 より大きな定数である。

5. target vector と mutant vector を交叉し, trial vector を作成する。
6. target vector と trial vector を比較し, 適合度が優れている方を target vector に上書きする。
7. 2 から 6 の操作を全個体に施すことで 1 世代とする。
8. 以上の操作を満足解が得られるまで繰り返す。

### 3 Re-Labeling Differential Evolution

組合せ最適化問題において解の遺伝子型として整数値の配列が用いられるが、これらの整数値は対象を識別するためのラベルでしかなく、値の大小などの数値としての意味合いを含まない。そのため、四則演算を用いた進化的操作を行う DE を組合せ最適化問題に適用した場合、識別番号の割り振り方が対象問題の難易度に大きく影響してしまうという問題が懸念される。この問題は DE の局所探索において優良解の近傍を座標空間上の距離の近さによって決定することに由来する。近傍解を遺伝子の数値の近さで定義する DE では、識別番号の割り振り方で近傍解も変わってしまうのである。識別番号の割り振り方によっては、実際には異なる性質を持ち、適合度が大きく異なる解を近傍解とした探索を行う可能性が高い。このような問題において、DE の差分ベクトルは大域的探索と局所探索の指標として機能しない。

Re-labeling Differential Evolution (RLDE)<sup>2)</sup> は探索を行いながら遺伝子の識別番号を割り振り直すことで効率的に解を求めることを目指した手法である。優れた適合度の要因となっている遺伝子に目星をつけ、それらの遺伝子が数値的に近い番号となるように割り振り直すことで、適合度が近い個体同士の差分ベクトルが小さくなる。この操作は、対立遺伝子毎に優れた適合度が期待できる度合いである優良度を求める第 1 段

階と、求めた優良度を基に識別番号を割り振り直す第 2 段化に分けられる

第 1 段階では、優れた適合度が期待できる遺伝子を見つける。しかし、ここで注意しなければならない点がある。IDE では、ユーザは個体に評価点を与えるのではなく対比較評価を行う。そのため、個体同士の優劣関係は不明であり、適合度自体を再割り振りの指標として使用することができない。そこで、優れた適合度の要因となっている遺伝子を推測する方法を提案する。DE では、探索が進むにつれて大域的最適解周辺に個体群全体が収束していき、適合度が劣る個体は集団から淘汰される (Fig. 1-2)。組合せ最適化において優良解に個体群が収束してくると、それらの解には共通した遺伝子が見られるようになる。これらが優れた適合度の要因となっている遺伝子であると考えられる。ここでは、個体群の中に頻出する遺伝子ほど優れているとして、高い優良度を与える。

第 2 段階では、優良度が高い順番に識別番号を割り振り直す。第 1 段階で求めた優良度が最も高い対立遺伝子を 1 とし、2 番めに高い対立遺伝子を 2、続けて 3、4 と割り振り直す (Fig. 3)。優良度が等しい対立遺伝子は直前の世代での識別番号の大小関係を保持するように新しい識別番号を割り振る。これらの操作は次元毎に独立して行われる。

通常の DE 演算によって解配列内に同じ数値が重複してしまう場合がある。順列ベース組合せ最適化問題では重複した数値を含む解を以下のように修正する。また、本論文では RLDE における順列表現として隣接表現を採用する。まず、解を先頭の都市から辿って行く。既に訪済みの都市が出現した場合、まだ訪問していない都市中で最も都市番号に近い都市を訪問する。この時、都市番号は初期状態のものではなく、RLDE によって再割り振りされたラベル付を使用する。順列の最後までこの操作を繰り返す。

進化計算アルゴリズムの外部のシステムは RLDE によって再割り振りされた識別番号を正しく認識することができない。そのため、これらのラベル再割り振りの処理は進化計算アルゴリズムの内部で完結している必要がある。RLDE では、mutant vector の生成に必要な最小限の個体のみを一時的に識別番号を再割り振りし、mutant vector を生成後、mutant vector も含めて本来の識別番号による表現に戻す。そのため、本来の識別番号と新しい識別番号の対応をリストとして保持しておく。解配列の配列番号  $i$  において、新しい識別番号は  $A_i$  次配列  $R_i$  に格納される。 $A_i$  は配列番号  $i$  における対立遺伝子数で、 $i$  は 1 ~ 遺伝子長  $D$  とする。 $R_{i,j}$  には解の配列番号  $i$  において本来の識別番号  $j$  の新しい識別番号  $r_{ij}$  が格納される。また、初期値は  $j$  を格納する。行列  $R$  の変更は  $G$  世代毎に行う。 $G$  は事前に設定する 1 以上の定数である。RLDE の具体的な手順を以下に記す。

1. 個体群、配列  $R$  を初期化する。
2.  $G$  世代毎に配列  $R$  を更新する。
3. target vector を決定する。全個体から順番に選ばれる

4. target vector 以外の個体から 3 個体  $X_{R1}$ ,  $X_{R2}$ ,  $X_{R3}$  をランダムに選択する.
5.  $X_{R1}$ ,  $X_{R2}$ ,  $X_{R3}$  を配列  $R$  を用いて識別番号を再割り振りする.
6. 1 より mutant vector  $M$  を生成する.
7. mutant vector,  $X_{R1}$ ,  $X_{R2}$ ,  $X_{R3}$  を配列  $R$  を用いて本来の識別番号に戻す.
8. target vector と mutant vector を交叉し, trial vector を作成する.
9. target vector と trial vector を比較し, 適合度が優れている方を target vector に上書きする.
10. 3 から 9 の操作を全個体に施すことで 1 世代とする.
11. 2 から 10 の操作を満足解が得られるまで繰り返す.

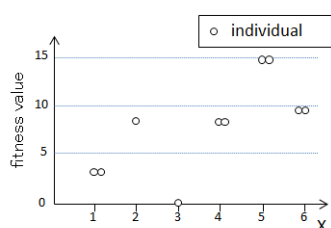


Fig. 1: In the early stages of optimization, individuals are widely distributed in the search space.

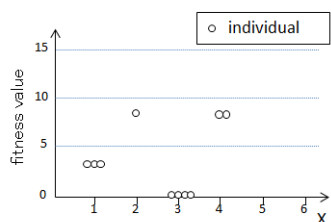


Fig. 2: In the last stages of optimization, individuals are converged at good solutions.

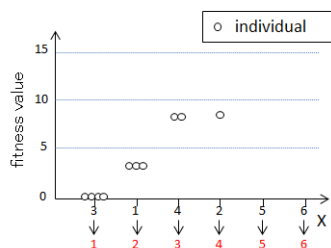


Fig. 3: Re-labeling DE sorts indices by the number of individuals which contain them.

## 4 実験条件

### 4.1 テスト問題

本論文では, いくつかのテスト問題を用いてシミュレーション実験を行う. 使用する問題は 1 つの組合せ最適化問題と 3 つの巡回セールスマン問題とする. 組合せ最適化問題  $F1$  では, 満足度の異なる  $A$  個の物体から 1 つを選択し, それを  $D$  回繰り返す. 適合度は選択した  $D$  個の物体の満足度の総和である. 従って, 解の配列

長は  $D$ , 解の各要素の対立遺伝子数は  $A$  となる. 巡回セールスマン問題  $F2, F3, F4$  は, Groetschel 17-city problem, Groetschel 21-city problem, Groetschel 24-city problem を使用する<sup>6)</sup>. 解の配列長  $D$  と各要素の対立遺伝子数  $A$  は都市数と同値となる. 巡回セールスマン問題は本来対話型進化計算のテスト問題ではないのだが, 順列が大きく変化すると適合度も大きく変化し, 順列の変化が小さいと適合度も大きな変化はしないという基本的な性質は人間の評価特性と一致するため, 本論文では対話型最適化問題のテスト問題として採用した. Table 1 に 4 つのテスト問題の具体的なパラメータ設定を示す. また, Table 2 に  $F1$  における満足度を示す.

Table 1: The parameters in five test problems. 'D' means length of solution arrays. 'A' means the number of alleles.

	D	A
F1	16	16
F2	17	17
F3	21	21
F4	24	24

### 4.2 比較手法

本シミュレーション実験では, すべてのテスト問題に対して個体数 10, 20, 30, 40, 50 として RLDE と GA の比較を行い, 個体数毎の各手法の特徴を考察する. RLDE の表現型は隣接表現を使用し, 交叉方法は binominal crossover とする. GA の表現型はパス表現, 交叉方法は  $F1$  では two-point crossover,  $F2$  から  $F4$  では edge recombination crossover<sup>7)</sup> を使用する. また, RLDE の探索は 1000 世代まで実行し, GA は RLDE の最終世代における評価回数と一致する世代まで実行する. これは GA のエリート戦略によって 1 世代毎の評価回数 (評価関数呼び出し回数) が異なるためである. Table 3 に各テスト問題における RLDE のパラメータ設定, Table 4 に GA のパラメータ設定を示す.

Table 3: The parameter settings of Re-labeling DE.

	Crossover rate(%)	F	G
F1	80	0.8	1
F2	30	0.5	1
F3	30	0.5	1
F4	30	0.5	1

Table 4: The parameter settings of Re-labeling GA.

	Crossover rate(%)	mutation rate(%)
F1	50	1
F2	50	5
F3	50	5
F4	50	5

## 5 実験結果と考察

Fig. 4 - Fig. 23 にそれぞれ個体数 10, 20, 30, 40, 50 とした  $F1, F2, F3, F4$  の実行結果を示す. 縦軸は各世代における最優良個体の適合度の 100 試行平均値, 横軸は評価回数である. 評価回数の最大値は 1000 世代での RLDE の評価回数とし, 個体数 \* 世代数によって導かれる. また, グラフ中の "GA" は GA の適合度の推

Table 2: The degree of satisfaction in F1 problem.

	the array element number															
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
object 1	6	96	11	20	51	42	38	68	27	97	38	61	62	32	72	75
object 2	63	2	43	74	29	65	64	62	95	15	89	17	59	78	20	69
object 3	74	44	9	67	61	49	42	32	43	64	47	93	11	61	36	55
object 4	85	52	96	6	22	91	39	47	69	50	92	34	24	45	79	57
object 5	64	81	80	22	0	72	61	51	83	76	15	38	84	63	83	96
object 6	87	83	22	58	39	1	13	52	11	11	29	10	43	90	47	30
object 7	59	57	88	95	65	15	4	31	18	13	72	70	10	61	45	67
object 8	86	53	88	78	23	97	67	6	66	49	60	85	23	67	70	45
object 9	48	61	98	56	65	70	98	24	9	35	60	21	71	30	89	48
object 10	66	45	52	19	30	68	96	40	70	10	87	68	61	90	32	65
object 11	68	93	81	47	65	70	19	19	18	20	2	74	34	95	62	64
object 12	44	85	82	52	44	25	68	70	97	42	55	9	73	71	38	52
object 13	49	16	51	33	94	28	28	69	97	36	57	36	8	50	89	11
object 14	36	40	56	26	91	42	67	38	89	53	92	33	35	4	96	52
object 15	90	17	80	79	71	21	24	22	52	20	18	26	96	86	7	37
object 16	15	68	71	76	50	77	99	80	55	71	92	45	48	98	62	7

移, "RLDE"はRLDEの適合度の推移, "best fitness"は対象問題の適合度の最適値を表す.

Fig. - Fig. は第 50 世代, 第 1000 世代における個体数毎の適合度の推移を各テスト問題毎にグラフ化したもので, 縦軸は最優良個体の適合度の 100 試行平均値, 横軸は個体数である. 全テスト問題において, 50 世代では 10 個体で RLDE は GA よりも同等以上の適合度となっている. しかし, RLDE は個体数が増えても適合度の変化は少なく, Fig. - Fig. では個体数が増えると GA よりも適合度が劣る. 一方, 1000 世代における適合度の推移を見てみると, RLDE は GA と同様に個体数が多いほど適合度も優れいき, 多個体では GA よりも優良となる. このことから, RLDE において個体数は探索初期よりも探索終盤に及ぼす影響が大きい事がわかる. これは, RLDE の識別番号の再割り振りが探索序盤のランダム探索よりも差分ベクトルが重要となる探索中盤, 探索終盤の局所探索において特に効果を発揮するためである. RLDE では, 探索を行いながら個体群分布情報を基に優良解に目星を付け, それらに収束を促すように識別番号の再割り振りを行う. つまり, 個体数が多く十分に大域的探索が行えるほど RLDE によって割り振り直された識別番号は信頼性のあるものになる. Fig. , Fig. の 1000 世代における適合度の推移を見てみると, RLDE の適合度は 10 個体と 20 個体の間で大きく変化している. これは個体数が少ないと大域的探索が十分に行われず, 局所最適解へ個体群収束を促すように識別番号の再割り振りを行ったためだと考えられる. この時, 再割り振りを行う間隔  $G$  を 10 世代毎などにすると序盤の収束速度は低下するが最終的にはより優れた解が得られる<sup>8)</sup>.

少個体数で探索序盤にある程度優良な解を得る必要がある対話型進化計算では, RLDE は少個体であっても安定して優良解が得ることができる. 一方, 解の精度が求められる通常の進化計算であっても, 極端に個体数が少なくない限り GA と同等以上の成果が期待できる. 以上のことから, RLDE は通常進化計算で GA 以上の性能が期待でき, 個体数が少なくても探索序盤に与える影響が少なく対話型進化計算手法としても有用であると言える.

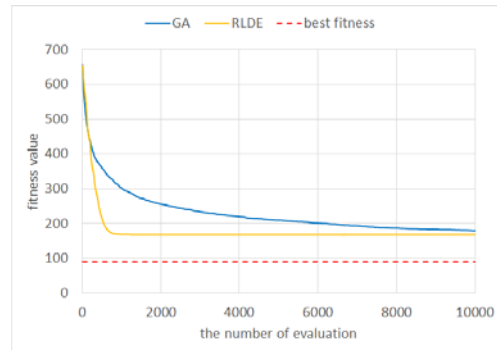


Fig. 4: The average convergences in F1 problem with 10 individuals.

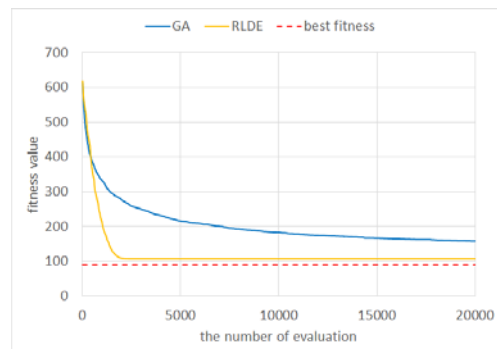


Fig. 5: The average convergences in F1 problem with 20 individuals.

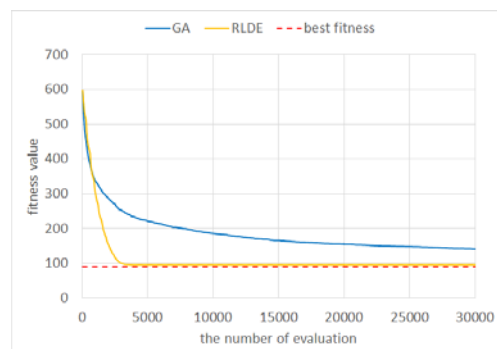


Fig. 6: The average convergences in F1 problem with 30 individuals.



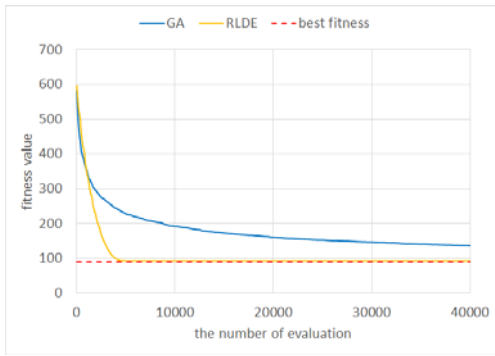


Fig. 7: The average convergences in F1 problem with 40 individuals.

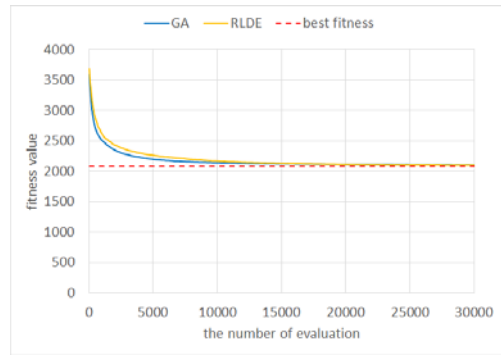


Fig. 11: The average convergences in F2 problem with 30 individuals.

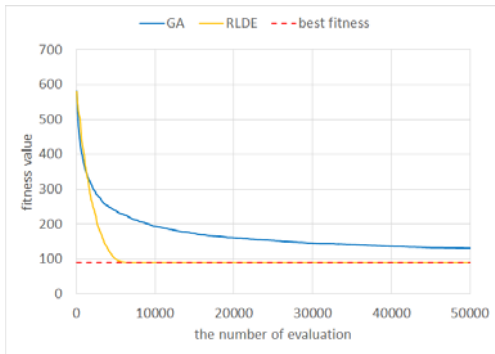


Fig. 8: The average convergences in F1 problem with 50 individuals.

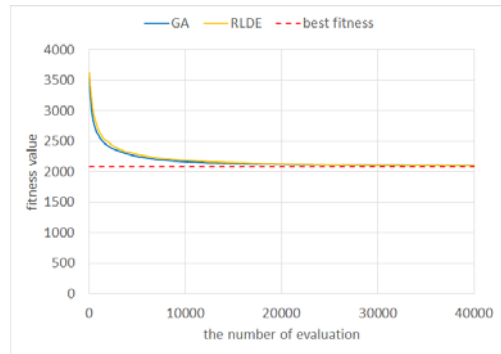


Fig. 12: The average convergences in F2 problem with 40 individuals.

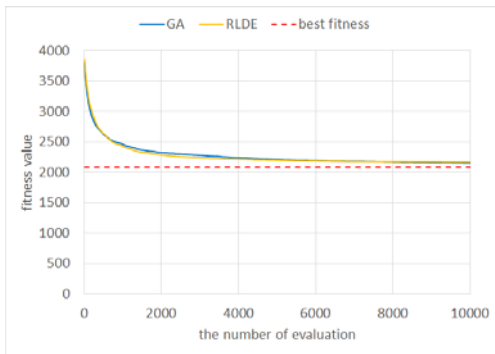


Fig. 9: The average convergences in F2 problem with 10 individuals.

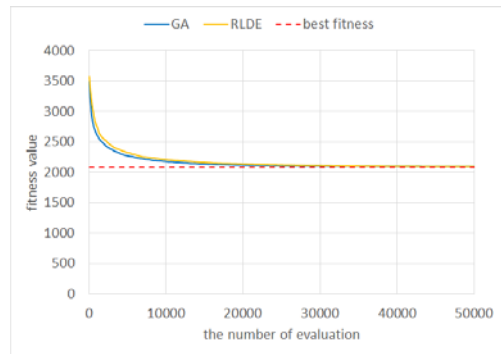


Fig. 13: The average convergences in F2 problem with 50 individuals.

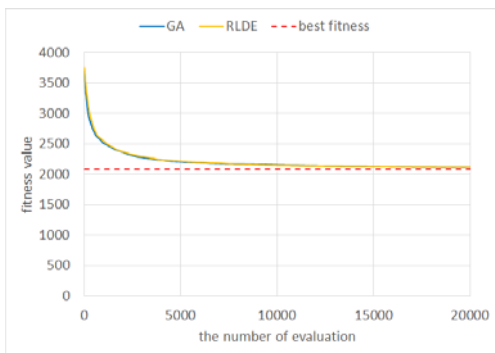


Fig. 10: The average convergences in F2 problem with 20 individuals.

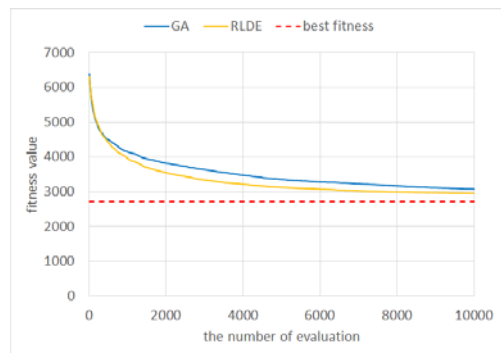


Fig. 14: The average convergences in F3 problem with 10 individuals.

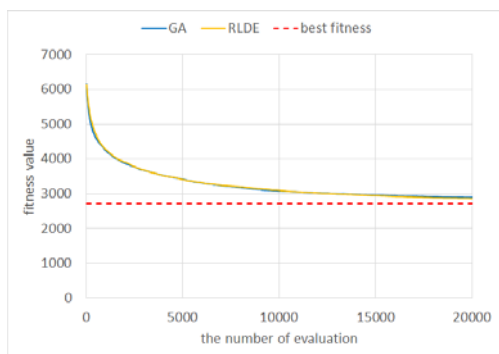


Fig. 15: The average convergences in F3 problem with 20 individuals.

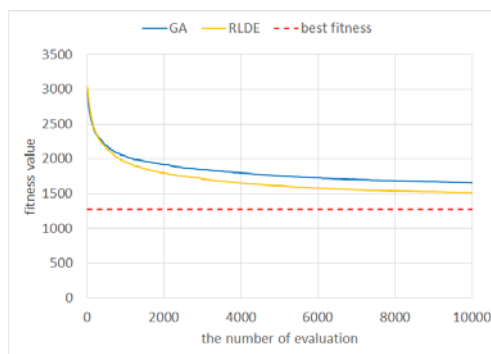


Fig. 19: The average convergences in F4 problem with 10 individuals.

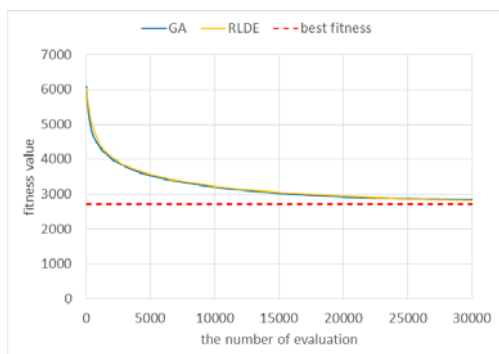


Fig. 16: The average convergences in F3 problem with 30 individuals.

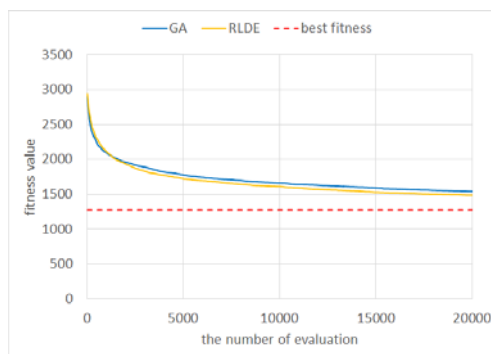


Fig. 20: The average convergences in F4 problem with 20 individuals.

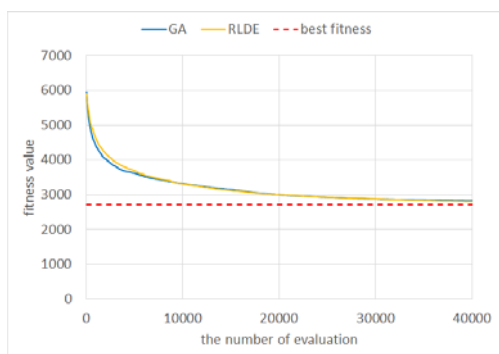


Fig. 17: The average convergences in F3 problem with 40 individuals.

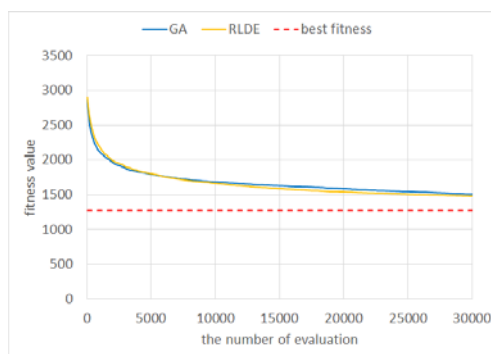


Fig. 21: The average convergences in F4 problem with 30 individuals.

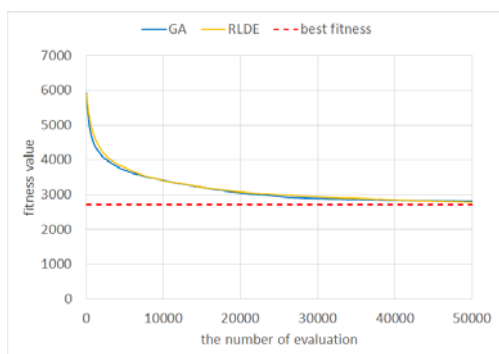


Fig. 18: The average convergences in F3 problem with 50 individuals.

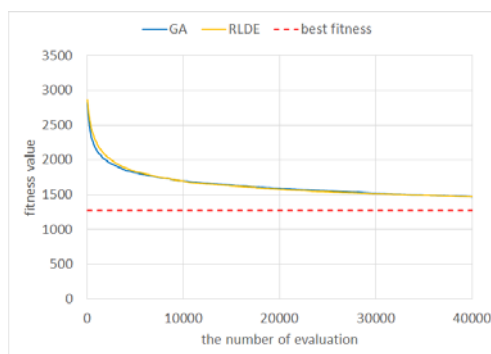


Fig. 22: The average convergences in F4 problem with 40 individuals.

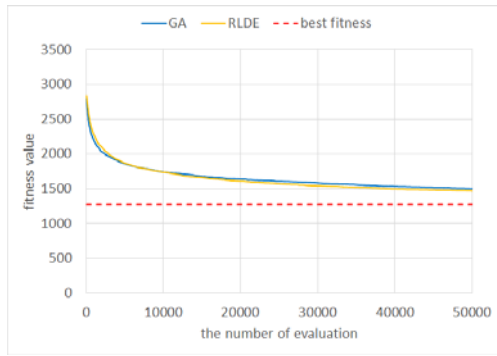


Fig. 23: The average convergences in F4 problem with 50 individuals.

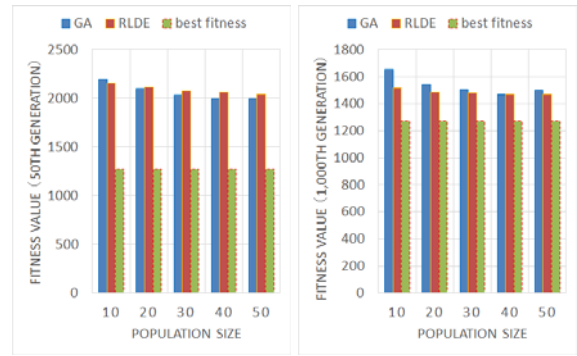


Fig. 27: The transitions of fitness value among the population size settings in the 50th generation and 1000th generation in F4 problem.

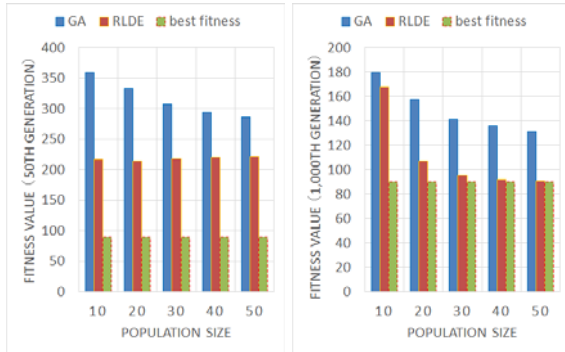


Fig. 24: The transitions of fitness value among the population size settings in the 50th generation and 1000th generation in F1 problem.

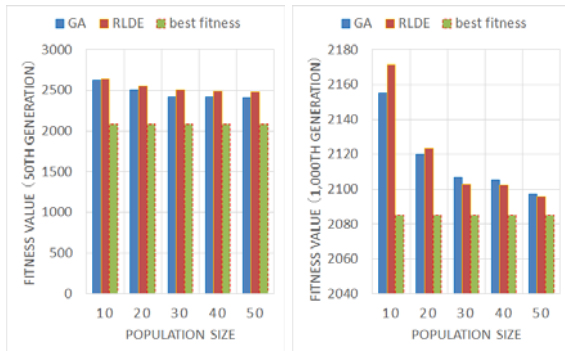


Fig. 25: The transitions of fitness value among the population size settings in the 50th generation and 1000th generation in F2 problem.



Fig. 26: The transitions of fitness value among the population size settings in the 50th generation and 1000th generation in F3 problem.

## 6 結論

本論文では、対話型進化計算の条件である少個体数、探索初期の探索性能に着目し組合せ最適化問題、順列ベース組合せ最適化を例題としてRLDEとGAを比較し、考察した。RLDEは十分な個体数で探索可能な問題においてGA以上の解の精度が期待でき、少個体数という条件下で早期に解を得る必要がある対話型差分進化では、個体数の影響をあまり受けることなく早期に優良解が得られる手法であるといえる。RLDEは対比較評価を実現しているため、全個体同時比較を行い評価点を与える必要がある対話型GAよりもユーザ疲労が少なく、個体数を増やしたり探索世代数を多く確保することができる。また、動画や音声の最適化であっても十分に個体数を確保して探索を行うことができるなど、今まで対話型進化計算の応用が困難であった問題への最適化も期待することができる。

## 参考文献

- 1) 船木亮平, 高木英行, 中川尚志, 永田里恵, 松本希「人工内耳パラメータフィッティングへの対比較ベース対話型差分進化の適用」第6回進化計算学会研究会, 東京, pp.179-181 (2014年3月)。
- 2) R. Funaki, H. Takano and J. Murata, "Re-labeling Differential Evolution for Combinatorial Optimization," SICE Annual Conference 2013, Nagoya (September, 2013).
- 3) H. Takagi and D. Pallez, "Paired Comparison-based Interactive Differential Evolution," The first World Congress on Nature and Biologically Inspired Computing (NaBIC2009), Coimbatore, India, pp.375-480 (December, 2009).
- 4) R. Storn and K. Price, "Minimizing the real functions of the ICEC'96 contest by differential evolution," the International Conference on Evolutionary Computation (ICEC1996), pp.842-844 (1996).
- 5) R. Storn and K. Price, "Differential evolution - a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces," Journal of Global Optimization vol.11, pp.341-359 (1997).
- 6) G. Reinelt, "TSPLIB," "<https://www.iwr.uni-heidelberg.de/groups/comopt/software/TSPLIB95/>".
- 7) D. Whitley, T. Starkweather and D. Fuquay, "Scheduling Problems and Traveling Salesmen: The Genetic Edge Recombination Operator," Proceedings of the Third International Conference on Genetic Algorithms, Morgan Kaufmann, pp.133-140 (1989).
- 8) 船木亮平, 高野浩貴, 村田純一「組合せ最適化問題におけるラベルの再割振りに関する研究」第4回コンピューショナル・インテリジェンス研究会, 福岡, pp.40-45 (2013年12月)。

# 簡易センサーのネットワークに基づく行動パターン認識

○蔡 家銘<sup>1</sup> 陳 栄静<sup>2</sup> 多屋 優人<sup>3</sup> 趙 強福<sup>1</sup>

## Behavior identification based on a network of simple sensors

<sup>1</sup>\*Chia-Ming Tsai and Qiangfu Zhao (University of Aizu)

<sup>2</sup>Rung-Ching Chen (Chaoyang University of Technology)

<sup>3</sup>Masato Taya (KDDI Research Institute)

**Abstract**— The basic concept of smart environment is to be aware of the context information related to environmental and human behavioral changes, and to provide appropriate services accordingly. To obtain the context information, people often use video cameras, microphones, and other devices. These devices, however, may cause privacy problem, and cannot be used in many situations. In this paper, we study human behavior identification based on network of simple sensors (NSS). The sensor used are just Zigbee infrared sensors, temperature sensors, and humidity sensors. We show through experiments that using these simple sensors it is possible to identify several behavior patterns such as out-door, sleeping, and so on; without identifying the subjects. Results given here will be useful for designing smart homes, smart office, and so on.

**Key Words:** Network of Simple Sensors, Fuzzy Logic, Smart Environment

## 1 Introduction

Smart space (e.g. smart home, smart office and smart super-market) is a hot research topic in recent years. In a smart space, many devices are usually combined together to form a monitoring system. This monitoring system can provide different information related to the environment and the users. Based on the information, a server can understand the current situation of the space (region of interests), and provide appropriate services.

Chan et al pointed out that in smart space related research, it is necessary to take into account the legal and ethical issues [1]. In order to effectively obtain environmental data, cameras, microphones, and different sensors, are commonly used. Cameras can collect a large amount of environmental data, but usually have a high cost for data analysis, and privacy is a great issue. Microphones can also collect environmental data, but some important conversation information can be leaked to some 3rd party. Simple sensors like infrared sensor, motion sensor, temperature, etc., can collect very limited data, and from these data it is usually difficult to identify the privacy of the users. Thus, monitoring systems based on network of simple sensors are considered more important in modern societies.

In this study, we deployed some Zigbee sensors in a typical Japanese style separate house, and collected data from each room. This time, we just used two types of sensors, namely infrared sensor (or human detection sensor) and temperature/humidity sensor. In this paper, we report analysis results obtained based on the single infrared sensor of each room. Analysis results of the whole monitoring system (network) will be reported later.

Note that due to different environment noises, sensor responses for different people can be different even if their activities are the same. Even for the same person, the sensor responses can be different when he/she does the same thing in different time intervals. To identify user activities in a more robust way, we use fuzzy logic in this paper, so that

noises can be compensated in the inference process. We try to identify four types of activities of a user, namely high (density) activity (HA), static activity (SA), sleep (S), and outdoor (O). According to the results obtained based on single sensor data of each room, the correct identification rate is 81.1%.

The rest of the paper is organized as follows. Section II provides a brief review of fuzzy logic and some preliminaries related to this research; Section III introduces the analysis method in detail; Section IV shows the experimental results; and Section V is the conclusion of this study.

## 2 Related works

In natural environments, many things cannot be expressed clearly by languages. The concept *young people* is an example. We cannot define the exact age of a young people because this concept is person dependent. Thus, uncertainties exist in natural environments. Zadeh proposed fuzzy sets in 1965<sup>2)</sup>. Fuzzy sets use membership functions to represent uncertain concepts. Fuzzy set theory and probability theory can be combined for information analysis with uncertain and incomplete data<sup>3)</sup>. Zadeh proposed fuzzy logic in 1973<sup>4)</sup>. Using fuzzy logic we can reason and make decisions in a similar way to that of human.

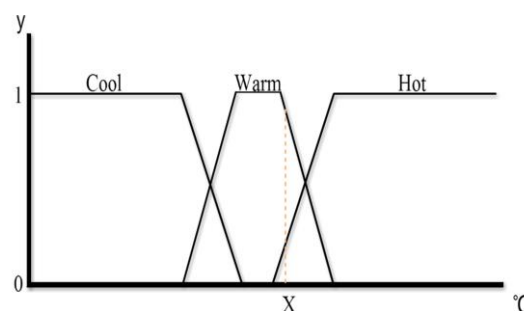


Fig. 1: Concept of Fuzzy logic.

Fig. 1 is an example of a fuzzy number (a special fuzzy set). In this figure, the concept temperature is described using three linguistic values, namely, cold, warm and hot. The y-axis is the degree of match (value of the membership function). For example, when the observed room temperature is  $x$  (see the position of  $x$  in the figure), we may say that the room is “warm.”

Mamdani et al use fuzzy logic to establish a fuzzy logic control (FLC) system in 1975<sup>5)</sup>, a FLC is shown in Fig 2.

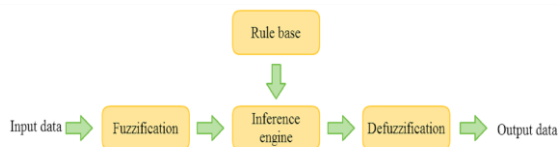


Fig. 2: FLC.

A FLC system contains the following components:

- Fuzzification: A fuzzifier to change the input data to the corresponding membership function values;
- Rule base: A rule base containing many IF-THEN rules;
- Inference engine: An inference engine to make decisions based on the rule base; and
- Defuzzification: A defuzzifier to change a fuzzy decision into actual values.

A smart home can provide corresponding services based on the user needs. In recent years, population aging increases the demand for senior care related services. Authors of<sup>6)</sup> pointed out that, although smart home is useful for senior care, we must take into account the privacy issue. Yang and Hsu have tried to use movement detector and appliance usage detector to monitor the environment for elderly people who are living alone. These two kinds of sensors can detect activity patterns and abnormal activities<sup>7)</sup>. Wang et al used sensors to record resident states of life, and generated activity density map. According to the activity density map, the server can understand the physical state of the residents and send a message to the care provider where there are some significant state changes<sup>8)</sup>. There are sensors for obtaining environmental information. There are also wearable sensors for obtaining patient’s physiological changes. Using information obtained by these sensors, medical staff can understand the physical condition of the patients, and this can reduce hospitalization costs<sup>9)</sup>.

How to effectively identify user activities is the core issue of a smart home. Because the activities in different environments, times, and locations can generate different results, uncertainty exist in the activity recognition process. In<sup>10)</sup> and<sup>11)</sup> the authors used multiple sensors to recognize activities in daily lives, but this may also disclose the privacy of the residents easily. Rashidi et al proposed a system of adaptive smart home "CASAS" using data mining to find activity patterns and produce the corresponding decision<sup>12)</sup>. Because the existence of uncertainties, Hong et al used Dempster–Shafer theory of evidence (DS theory) to quantify the uncertainty of the data to identify the daily activities<sup>13)</sup>.

In<sup>14)</sup>, the residents are assumed to accept sensor monitoring. For cameras monitoring, however, this assumption may not be true. We should use simple sensors to collect data to reduce resident’s privacy issues. Using simple sensors, however, will increase the uncertainty. To solve this problem, we use fuzzy logic so that activity identification can be performed via human-like reasoning based on uncertain data.

### 3 Research Methods

Different environments and time easily affect the activities of residents. We do not know at which time residents will execute what activities. But after a long period of observations, we may learn and identify some regular activities, and detect these activities easily based on time information. That is, we may use a weight to specify the possibility of an activity to appear at a certain time. Specifically, the weights are defined as follows:

$$AW_{activity} = \{w_1, w_2, w_3, \dots, w_{144}\}$$

$$w_i = \frac{activity_i}{all\_activity_i} \quad (1)$$

And the values are given in Table 1.  $AW$  is composed of 144 time point (10 minutes);  $w_i$  is weight in the  $i$ -th time point;  $activity_i$  is single activity in the  $i$ -th time point of number of occurrences;  $all\_activity_i$  is all activity in the  $i$ -th time point of number of occurrences.

Table 1 Activity Weights (AW).

Activity\Time	1	2	3	...	144
$AW_O$	0.071	0.071	0.071	...	0.071
$AW_S$	0.571	0.571	0.571	...	0.428
$AW_{SA}$	0.285	0.285	0.285	...	0.428
$AW_{HA}$	0.071	0.071	0.071	...	0.071

Because human cannot describe the degree of an activity exactly, we use fuzzy logic to transform the *activity degree* (AD) into four levels: very low, low, high, and very high. In the way, we can transform the *activity variation degree* (AVD) divided into 3 levels: Minus, Constant and Plus.

The Infrared Sensors (IS) data have only two states 1 and 0. The sensor output is 1 when an activity is detected; and 0 otherwise. If there is nobody in the room, IS sends one output in 10 seconds (or 6 outputs in one minute). If there is someone in the room, the IS may send an output in less than 10 seconds (or more than 6 outputs per minute). To stabilize the results, we use the AD value observed in 10 minutes, and this is defined as follows:

$$AD_i = \frac{\sum tf_i}{\sum (tf_i + ntf_i)} \quad (2)$$

Where  $AD_i$  is the AD at the  $i$ -th time point;  $tf_i$  is the number of *trigger-on* of the IS between the  $(i-1)$ -th and the  $i$ -th time points, and  $ntf_i$  is the number of *trigger-off* in the same time period.

In our daily lives, our activities are usually continuous. There exists some connection between one activity and another. Thus, to identify the activities more accurately, we should also consider the correlation between activities. A simple way is to approximate the AVD using a line given as follows:

$$y_n = \beta_1 + n\beta_2 \quad (3)$$

Where  $\beta_1$  and  $\beta_2$  are parameters of the line, and can be optimized using the least squares method. The parameter  $\beta_2$  can be used as the AVD. In the experiments, we used 6 AD values to find the line, and the error to minimize is given as follows:

$$error = \sum_{i=0}^5 (AD_{n-i} - \beta_1 - (n-i)\beta_2)^2 \quad (4)$$

The above defined AD and AVD are used as the input data of the FLC. Fig 3 and 4 are the membership functions of AD and AVD, respectively. According to the membership functions, we can be define 12 rules for reasoning, Table 2 is the rule table. We use gravity method to calculate the four kind's activities degree of similarity. Results of Inference multiplied with AW are then used to find the find output, which is the position of the maximum value of the four results.

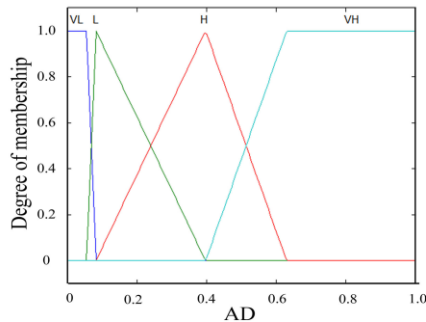


Fig. 3: AD membership functions.

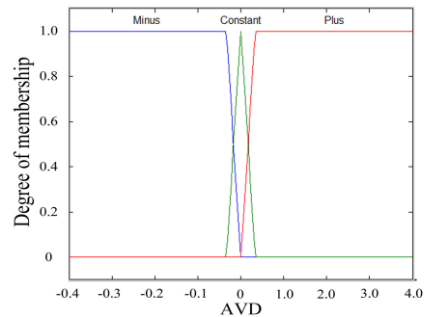


Fig. 4: AVD membership functions.

## 4 Experimental results

Experimental environment is a typical Japanese style separate house. There are 6 residents, but one did not participate in the experiment. This experiment used Zigbee sensors for data collection. An IS was installed in each

room except one. Experimental environment shown in Figure 5. The data collected two weeks, the first week as a statistical use, the second week as the test data, Results in Table 3.

In this study, activity identification accuracy is 81.1% in average. According FLC output, S and O are the most difficult activities for identification. The reason might be that for sleeping, the AD is usually 0, which is similar to that for out-door. We can use the weights (AW defined earlier) to correct the false results in normal days. For some resident, the activity identification rate can as high as 95.1%.

AW is based on a week's activity record (Including two holidays). Residents are generally at home in holidays. Thus, using the weight can increase the identification rate for normal days, but cannot improve the performance in holidays.

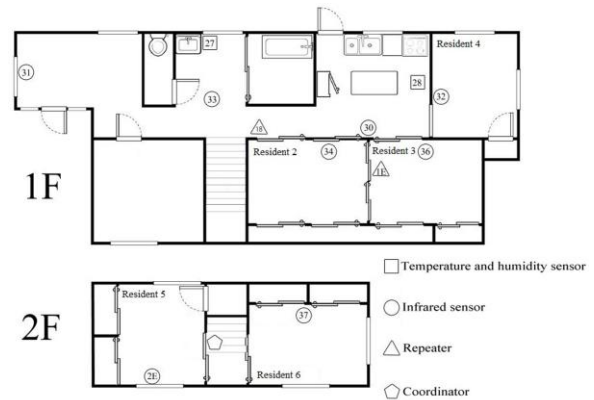


Fig. 5: Experimental environment.

Table 2: Fuzzy rules for the proposed system.

AVD \ AD	Activity \ AD	VL	L	H	VH
Minus	O	H	M	L	L
	S	M	H	M	L
	SA	M	M	H	M
	HA	L	L	M	H
Constant	O	H	L	L	L
	S	L	H	M	L
	SA	L	L	H	M
	HA	L	L	M	H
Plus	O	M	L	L	L
	S	H	H	L	L
	SA	M	L	H	M
	HA	L	L	M	H

## 5 Conclusion

We propose a method using a simple sensor network based on fuzzy logic identification activities. In this method AD and AVD are first calculated and then used to make a

decision based on fuzzy rules. According to records of actual activities, we also defined the weights to improve the performance for normal days. In average, the system based on AD, AVD and AW can identify the activities quite well, and the identification rate is 81.1%.

## 6 Future Works

AW easily for non-regular activities recognition errors. Therefore, AW will be amended to improve the non-regular activities recognition. This experiment Have using other sensors, but not using the present method. In the future works will be using other sensor data and expansion four kinds of activities. Let the system identify more activities.

Table 3: Activity recognition rate.

Date \ Resident	No. 2	No.3	No.4	No.5	No.6
5/9	91.7%	79.9%	95.1%	91.7%	89.6%
5/10	42.4%	81.9%	66.7%	56.3%	76.4%
5/11	72.2%	58.3%	82.6%	61.1%	65.3%
5/12	77.8%	58.3%	90.3%	91.0%	81.3%
5/13	94.4%	80.6%	88.2%	90.3%	94.4%
5/14	92.4%	81.9%	93.1%	82.6%	95.8%
5/15	92.4%	82.6%	90.3%	82.6%	89.6%
Mean	80.5%	74.8%	86.6%	79.4%	84.6%
Overall mean	81.1%				

## Reference

- Chan, M., Estève, D., Escriba, C. and Campo, E. : A review of smart homes—Present state and future challenges, *Computer methods and programs in biomedicine*, **91**-1, 55/81(2008)
- Zadeh, L. A. : Fuzzy sets, *Information and control*, (8)-3, 338/353(1965)
- Hüllermeier, E. : Fuzzy sets in machine learning and data mining, *Applied Soft Computing*, **11**-2, 1493/1505(2011)
- Zadeh, L. A. : Outline of a new approach to the analysis of complex systems and decision processes, *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics: Systems*, , **SMC-3**-1, 28/44(1973)
- Mamdani, E. H. and Assilian, S. : An experiment in linguistic synthesis with a fuzzy logic controller, *International journal of man-machine studies*, **7**-1, 1/13(1975)
- Chan, M., Campo, E., Estève, D. and Fourniols, J. Y. : Smart homes—current features and future perspectives, *Maturitas*, **64**-2, 90/97(2009)
- Yang, C. C. and Hsu, Y. L. : Remote monitoring and assessment of daily activities in the home environment, *Journal of Clinical Gerontology and Geriatrics*, **3**-3, 97/104(2012)
- Wang, S., Skubic, M. and Zhu, Y. : Activity density map visualization and dissimilarity comparison for eldercare monitoring, *Information Technology in Biomedicine*, *IEEE Transactions on*, **16**-4, 607/614(2012)
- Demongeot, J., Virone, G., Duchêne, F., Benchetrit, G., Hervé, T., Noury, N. and Rialle, V. : Multi-sensors acquisition, data fusion, knowledge mining and alarm triggering in health smart homes for elderly people, *Comptes Rendus Biologies*, **325**-6, 673/682(2002)
- Chen, L., Nugent, C. D. and Wang, H. : A knowledge-driven approach to activity recognition in smart homes, *Knowledge and Data Engineering*, *IEEE Transactions on*, **24**-6, 961-974(2012)
- Medjahed, H., Istrate, D., Boudy, J. and Dorizzi, B. : Human activities of daily living recognition using fuzzy logic for elderly home monitoring. *International Conference on FUZZ-IEEE 2009: Fuzzy Systems*, 2001/2006(2009)
- Rashidi, P. and Cook, D. J. : Keeping the resident in the loop: Adapting the smart home to the user. *Systems, Man and Cybernetics, Part A: Systems and Humans*, *IEEE Transactions on*, **39**-5, 949-959(2009)
- Hong, X., Nugent, C., Mulvenna, M., McClean, S., Scotney, B. and Devlin, S. : Evidential fusion of sensor data for activity recognition in smart homes, *Pervasive and Mobile Computing*, **5**-3, 236/252(2009)
- Ding, D., Cooper, R. A., Pasquina, P. F. and Fici-Pasquina, L. : Sensor technology for smart homes, *Maturitas*, **69**-2, 131/136(2011)

# レシピオントロジに基づく食物の推薦システムの構築

○丁昱衡<sup>1</sup> (会津大学) 陳榮靜<sup>2</sup> (朝陽科技大学) 趙強福<sup>3</sup> (会津大学)

## A dietary recommendation system based on recipe ontology

\* Yu-Hsien Ting<sup>1</sup> and Qiangfu Zhao<sup>3</sup> (University of Aizu),

Rung-Ching Chen<sup>2</sup> (Chaoyang University of Technology)

**Abstract**— The improvement of medical technology has led to a longer life expectancy. However, unhealthy diet, irregular life, work pressure and other factors, result in a number of diseases. Diabetes mellitus, peptic ulcer, and gastro-enteritis are just a few examples. To reduce these diseases, diet management is becoming an indispensable part in our daily lives. The main purpose of this study is to build a diet management system that can provide the users correct nutritional information based on a recipe ontology. In this paper, we first construct a recipe ontology that defines various food nutrients needed for healing some common diseases. We then construct an inference engine that can, given the user's health conditions as well as his/her preferences, recommend a proper menu in each day based on the recipe ontology.

**Key Words:** Recipe, Ontology, Dietary recommendation

## 1 Introduction

With the advance of medical science and technology; increase in personal income; and improvement in living standards, our life span has been increased significantly. However, unhealthy diet, irregular life style, work pressure and other factors, can result in a number of diseases. Diabetes mellitus, Cardiovascular, peptic ulcer and gastro-enteritis are just a few examples. In fact, people are now spending more for medical care than ever before. According to the Ministry of Health of Japan<sup>14)</sup>, the prevalence of these common diseases is increasing gradually, and the average ages of people suffering these diseases are decreasing. In order to increase the quality of living and to reduce the expenses for medical care, it is important to understand the dietary type and suitable intake, and to avoid uneven or inappropriate diet.

The main purpose of health care is to achieve a balanced and healthy diet in our daily lives, to reduce the chances to visit hospitals. In recent years, diet management is becoming an important topic, and is now an indispensable part of our daily lives. The Ministry of Education of Japan is building a Food Composition Database website<sup>5)</sup> that provides nutrients of food query. Using this website, users can know the nutrients intake, and may make a balanced diet each day. However, the website does not maintain long-term personal diet records, and thus cannot provide appropriate diet information for each user.

In this study, in order to provide better nutritional information for each user, we propose a recipe ontology (RO) which is built based on SPARQL Protocol and RDF Query Language (SPARQL); and a dietary recommendation system (DRS) based on the above RO and a JENA Semantic Web Framework (JENA). Our design goal is to make this DRS able to analyze whether a user has a balanced diet based on the user's own situation, and recommend suitable diet recipes for the user.

For users suffering from some diseases but in an early stage, he/she can use the DSR system to find out the rela-

tionship between diet and diseases, and the DSR system can recommend suitable dietary plan based on the user's personal needs and preference.

## 2 Related work

Recipe recommendation has been an important topic for many years. Generally speaking, recipe recommendation is based on the user's history record<sup>12)13)16)</sup>. Geleijnse et al.<sup>6)</sup> represented in a prototype of a personalized recipe advice system, which can suggest recipes based on the user's history, which includes past selection and nutrient intake. From the history record, it is possible to know whether a user's diet or nutrients intake is balanced or not.

How to achieve health through diet is a relatively new research topic. Chiu-Ming Hu<sup>2)</sup> built a recipe ontology based on common food recipes and a food composition database. Using this ontology, it is possible to establish nutritional and food information related for recipe, provide nutrient information, and calculate nutrients intake and dietary record. This approach only constructs the recipe and nutrients ontology, and does not suggest to the users personalized information, include influence of nutrients relationship between recipes.

Lo et al.<sup>1)</sup> proposed a method for finding the most suitable types of dietary health therapy based on the user's own dietary needs or expectations of suffering a certain disease. This method allows users to reach a balanced and healthy diet goal, and thus can be used to improve the user's own dietary health care therapy. However, this method does not record the user's diet status, and does not manage long-term record of each user.

Su et al.<sup>3)</sup> designed a Diet-Aid web service based on health screening data of Health Level Seven International (HL7), according to the user's health status, given appropriate dietary recommendations. In contract, this paper proposes a personalized recipe based on availability of personal nutritional needs, and have long-term record. However, this approach has not present how to prevent the diseases of nutrients relationship between recipe.



## 2.1 Ontology

In computer science and information science, an ontology formally represents knowledge as a hierarchy of concepts within a domain, using a shared vocabulary to denote the types, properties and interrelationships of those concepts <sup>15)</sup>. An ontology is a description (like a formal specification of a program) of the concepts and relationships that can formally exist for an agent or a community of agents. This definition is consistent with the usage of ontology as set of concept definitions, but more general <sup>21)</sup>.

Ontologies are often equated with taxonomic hierarchies of classes, class definitions, and the subsumption relation, but ontologies need not be limited to these forms. Ontologies are also not limited to conservative definitions, that is, definitions in the traditional logic sense that only introduce terminology and do not add any knowledge about the world. To specify a conceptualization, one needs to state axioms that do constrain the possible interpretations for the defined terms <sup>15)</sup>.

Common components of ontologies include classes, attributes, relations, individuals, rules and axioms. A class can be defined as a concept. Attributes are properties of objects in a class. Some attributes can be used to describe relationships between individuals. Relations connect different classes or individuals to each another. Instances are the basic objects, and through properties connect to classes. Rules use if-then sentences to describe the logical reasoning. Axioms are specific logical assertions.

## 2.2 SPARQL

SPARQL is a recursive acronym for SPARQL Protocol and RDF Query Language. SPARQL essentially consists of a standard query language for retrieving and manipulating data stored in Resource Description Framework format. It was made a standard by the RDF Data Access Working Group (DAWG) of the World Wide Web Consortium <sup>10)</sup>. SPARQL queries hide the details of data management, which reduces costs and increases robustness of data integration on the Web. "Trying to use the Semantic Web without SPARQL is like trying to use a relational database without SQL," explained Tim Berners-Lee, W3C Director <sup>7)</sup>. Therefore, SPARQL has become an official W3C Recommendation.

SPARQL uses query SELECT to extract RDF/OWL repository. It can also use the CONSTRUCT query to construct a new triples from existing ones, so it is different from the SQL. An SPARQL query example that models the question "What are the capitals of all countries in Africa?" is shown in Fig. 1.

```

PREFIX abc: <http://example.com/exampleOntology#>
SELECT ?capital ?country
WHERE {
  ?x abc:cityname ?capital ;
     abc:isCapitalOf ?y .
  ?y abc:countryname ?country ;
     abc:isInContinent abc:Africa .
}

```

Fig 1: SPARQL program example

Variables are indicated by a "?" or "\$" prefix. The data set are bindings for ?capital and the ?country will be returned. In the query, the prefix "abc" stands for "http://example.com/exampleOntology#" <sup>20)</sup>.

## 2.3 JENA

Jena is an open source Semantic Web framework for Java. It provides an API to extract data from and write to RDF graphs. The graphs are represented as an abstract "model". A model can be sourced with data from files, databases, URLs or a combination of these. Jena provides support for OWL (Web Ontology Language). The framework has various internal reasoners and the Pellet reasoner (an open source Java OWL-DL reasoner) can be set up to work in Jena <sup>9)</sup>.

The Jena API fully implements the RDF specification. The Jena Architecture is shown in Fig. 2.

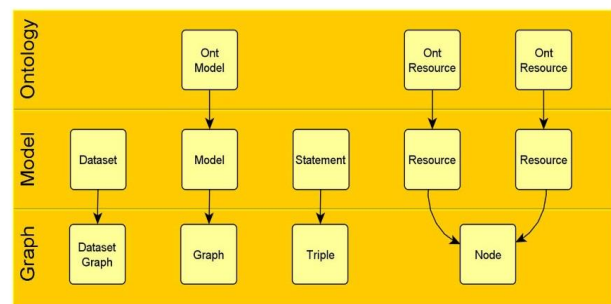


Fig 2: Jena architecture <sup>4)</sup>.

From the above figure we can know, the Graph layer is the base layer; is a SPI (Service Provider Interface), but if you want to use this product, must to extend support of Jena. The Model layer is creating a triple, and is an API (Application Provider Interface). That most developers should use to leverage Jena support in a business application in Model layer. The final layer is Ontology layer, and is an Inference API. This layer is not the best performance, but it has the smallest and trivial data sets.

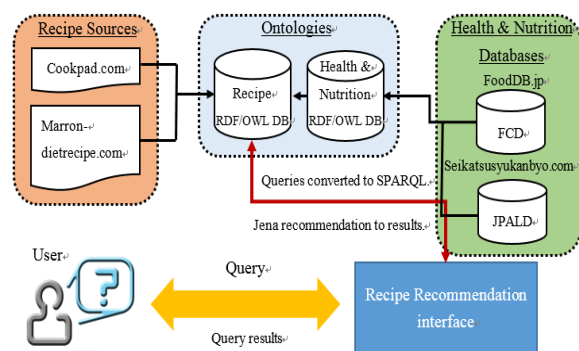


Fig 3: Dietary recommended system architecture

## 3 Dietary Recommended System (DRS)

This study proposes a Dietary Recommended System that can analyze whether a user has a balanced diet based on the user's own situation, and recommend suitable diet recipes for the user. This DRS can be used by different users and

each user can obtain his/her personal recommendations. The system architecture diagram is shown in Fig. 3.

The recommendation process of the DSR system is divided into five steps as follows:

- (1) Recipe are extracted from two source websites <sup>18)</sup> <sup>19)</sup>. These websites only provide the specified recipe.
- (2) A Health and Nutrition database is built based on data extracted from the Food Composition Database (FCD) <sup>5)</sup> and source of Japan Preventive Association of Life-style related Disease (JPALD) <sup>8)</sup>. This database provides various nutrient, an adult intake nutrient needed in a day and calculate the amount of nutrient to eat in one meal.
- (3) The ontology is constructed from Recipe, FCD and JPALD, and this ontology defines the relationship between recipe to nutrients and diseases. The relationship not only provides recipe queries, but also indicates a balanced diet of nutrients intake, and the way for prevention of life-style-related disease <sup>11)</sup>.
- (4) The recipe recommendation interface uses PHP, HTML and MYSQL to construct a website. The users, after sign-in, by providing some limited personal information related to his/her reference and health condition, can obtain better recommendations. A long-term diet record is used to manage the health status of each user.
- (5) User's query is converted using ontology to SPARQL queries, and this is used to query the recipe ontology. The DSR then makes a recommendation through JENA inference.

### 3.1 Knowledge Base in Ontology used Protégé

Protégé was developed by Stanford Center for Biomedical Informatics Research at the Stanford University School of Medicine. Protégé is a free, open-source platform that provides a growing user community with a suite of tools to construct domain models and knowledge-based applications with ontologies <sup>17)</sup>.

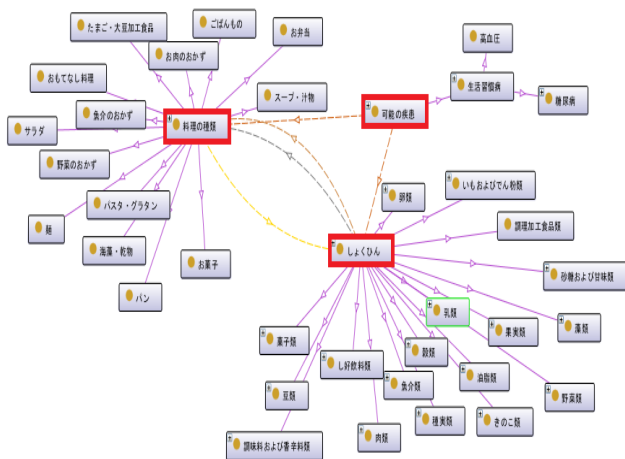


Fig 4: Schematic diagram of ontology relationships

DSR knowledge base has three classes, recipe, food and diseases as Fig. 4. The food classes are related with recipe by “is part of”, and reversely recipe classes are related with food by “ingredients”. The recipe and food are related to disease classes via “prevent”, and reversely, the diseases are related to recipe and food via “improve”.

In our system, foods are classified into 18 categories, according to the Ministry of health that establishment based on the Food Composition Database website. The food subclass attributes include weight and nutrition, and the attribute values for real instances.

### 3.2 Knowledge Base retrieve and recommended

The knowledge base retrieval recipes that matches the user preferences, through user data given fit dietary recommended. In this study, using SPARQL and JENA methods provide users with personalized systems. The first to load knowledge base, user’s personal data from the user profile and dietary records. Then has used a series of SPARQL queries to generate a personalized diet. Third, used the results of SPARQL, through JENA rules to find out the most suitable for the user’s recommended recipes. Fig. 5 shows the example of SPARQL.

```
"PREFIX recipe:<http://www.semanticweb.org/ontologies/2014/1/recipe#>"
"PREFIX rdf:<http://www.w3.org/1999/02/22-rdf-syntax-ns#>"

SELECT ?recipe WHERE {

    ?type recipe:name ?recipe
}
```

Fig 5: A sample of SPARQL query

## 4 Implementation

DRS is built on Microsoft Windows Professional 7. The system uses MySQL database to record user history. The system server is Apache Server. PHP, HTML, and JavaScript are used to construct the system website. Protégé is used to develop the ontology, and the ontology is used along with the Eclipse-based JENA.

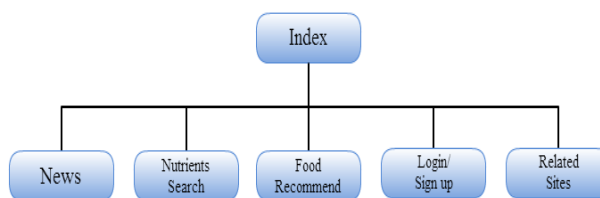


Fig 6: DSR basic site structure

The DRS interface includes news, nutrients search, food recommendation, login/sign up and related sites (Fig. 6). In the News page, a “recipe of day” is posted for everyone. Nutrients search page provides food nutrients from which users can know how many nutrients they should obtain each

day. Food recommend page includes three sections, namely, general, prevention diseases, and dieting. The user can choose one to fit his/her current situation. Through signup and checking some items, the users can get better dietary advices and recommendations to fit their preferences. The basic site structure of the DRS is shown in Fig. 6. The user registration information is shown in Fig. 7.

## 5 Conclusion and Future Works

In this paper we have studied design of an ontology-based dietary recommendation system (DRS) that can analyze whether a user has a balanced diet based on the user's own situation, and recommend suitable diet recipes for the user. The DRS consists of a recipe ontology (RO) which includes SPARQL Protocol and RDF Query Language (SPARQL); and an inference engine based on JENA Semantic Web Framework (JENA). The main purpose of this study is to consider the personal health information and give users different dietary recommendations, to improve the user's physical condition. In order to provide the more recipes, it is needed to collect a lot of recipes; improve the website contents, extend website functionality; recommend with high accuracy; increase SPARQL query ability; and provide suitable JENA recommendation rules. We would like to solve the problems step by step in the future.

Fig 7: DRS user registration website

## References

- 1) Chi-Chun Lo, Chi-Hua Chen, Chih-Chien Lu, and Ding-Yuan Cheng: The Design and Implementation of a Curative Food Recommendation Mechanism Using Chinese Food Therapy as a Case Study, *Journal of e-Business*, **14**-3, 513/548 (2012)
- 2) Chiu-Ming Hu: A nutrition analysis system based on recipe ontology, University of Taipei Medical (2006)
- 3) Chuan-Jun Su, Chia-Wen Chih and Yin-An Chen: Ontology-based Personalized Diet Plan Web Service Using HL7 Health Screening Data, *Proceedings of the Asia Pacific In-*

- dustrial Engineering & Management Systems Conference, 1164/1176 (2012)
- 4) Craig Trim, A Semantic Web Framework, <http://trimc-nlp.blogspot.jp/2013/06/introduction-to-jena.html> (2013)
- 5) Food Composition Database website: <http://fooddb.mext.go.jp>
- 6) Gijs Geleijnse, Peggy Nachtigall, Pim van Kaam, and Lucienne Wijgergangs, A personalized recipe advice system to promote healthful choices, *IUI '11 Proceedings of the 16th international conference on Intelligent user interfaces*, 437/438 (2011).
- 7) Ivan Herman: W3C semantic web, [http://www.w3.org/blog/SW/2008/01/15/sparql\\_is\\_a\\_recommendation](http://www.w3.org/blog/SW/2008/01/15/sparql_is_a_recommendation) (2008).
- 8) Japan Preventive Association of Life-style related Disease, <http://seikatsusyukanbyo.com>
- 9) Jena introduction, Wikipedia, [http://en.wikipedia.org/wiki/Jena\\_\(framework\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Jena_(framework))
- 10) Jim Rapoza: SPARQL Will Make the Web Shine. *eWeek*. <http://www.eweek.com/c/a/Application-Development/SPARQL-Will-Make-the-Web-Shine/> (2006)
- 11) Lifestyle-related disease, Wikipedia, <http://ja.wikipedia.org/wiki/%E7%94%9F%E6%B4%BB%E7%BF%92%E6%85%A3%E7%97%85>
- 12) Martin Svensson, Kristina Höök, and Rickard Cöster: Designing and evaluating kalas: A social navigation system for food recipes, *ACM Transactions on Computer-Human Interaction (TOCHI)*, **12**-3, 374/400 (2005).
- 13) Mayumi Ueda, Mari Takahata, and Shinsuke Nakajima: User's food preference extraction for personalized cooking recipe recommendation, *Proc. of the Second Workshop on Semantic Personalized Information Management: Retrieval and Recommendation*, **781**-6, 98/105 (2011).
- 14) Ministry of Health of Japan, <http://www.mext.go.jp/>
- 15) Ontology (information science) From Wikipedia, [http://en.wikipedia.org/wiki/Ontology\\_\(information\\_science\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Ontology_(information_science))
- 16) Peter Forbes and Mu Zhu: Content-boosted matrix factorization for recommender systems: Experiments with recipe recommendation, *Proceedings of Recommender Systems (2011)*.
- 17) Protégé official website, <http://protege.stanford.edu>
- 18) Recipe, COOKPAD, <http://cookpad.com>
- 19) Recipe, 料理レシピ, <http://marron-dietrecipe.com/category/category.html>
- 20) SPARQL introduction, Wikipedia, <http://en.wikipedia.org/wiki/SPARQL>
- 21) Tom Gruber: What is an Ontology, <http://www-ksl.stanford.edu/kst/what-is-an-ontology.html> (1992)

# 未知の問題状況に対処するための脳機能

## 「試行錯誤による探索」と「知識による解決」: 2つの方略を司る神経機構

○小川 正 (京都大学大学院医学研究科)

### Intelligent behaviors in a changing environment: Solutions to novel problems through switching between trial-and-error and knowledge-based strategies

\* T Ogawa (Kyoto University)

**Abstract**— When facing novel problems, humans and primates could seek appropriate problem solutions through trial-and-error (TE) actions and observation of their outcomes. Once an individual has obtained the knowledge to solve a problem, knowledge-based (KB) actions may be applied in a stereotypical manner to solve the problem. Solutions can thus be based on switching of TE or KB strategies. We trained laboratory monkeys to perform a target-tracking visual search task and examined the problem solution process. The present study provided behavioral and neuronal evidence how the brain appropriately control the timing and manner of switching between TE and KB strategies during the process of updating knowledge to solve a novel problem.

**Key Words:** trial-and-error search, knowledge-based solution, exploration, exploitation, primates

## 1. はじめに

ヒトや動物は未知の問題状況に遭遇しても、「試行錯誤による探索」によって問題解決のための知識を探し出し、その後は「知識による解決」によって試行錯誤なしに問題に対処することができる。例えば、未知の森でさまざまな色の木の実を食べたとき、「赤色の実は美味しかったが、他の色の実は不味かった」という試行錯誤的な経験を繰り返せば、最終的には「赤い色が美味しい」という新たな知識を獲得して、最初から赤い色の木の実を探すようになるだろう (Fig. 1)。このような2つの方略は、機械学習理論で考えられている *exploration* と *exploitation* に類すると考えられる<sup>1)</sup>。

神経生理学的手法を用いた先行研究では、動物 (サル) に 1 or 2 つ程度のルールを学習させて行動課題を遂行させると、前頭前野皮質において課題に関連

するニューロン活動が見いだされることが報告されている<sup>2-5)</sup>。しかしながら、現実世界では状況が常に変動して未知問題が次々と生み出されるため、限られた少数の知識だけでは有効的な対処を行うことは不可能である。未知の問題状況に遭遇する度に、多数オプションからひとつを選び、その有効性を確認する試行錯誤を繰り返して行うことが重要になる。本研究では、多数のオプションから有効な解決法を見いだすことが繰り返され求められる状況において、「試行錯誤による探索」と「知識による解決」の2方略を適切に切り替える脳神経機構を明らかにすることを目的とする<sup>8,9)</sup>。

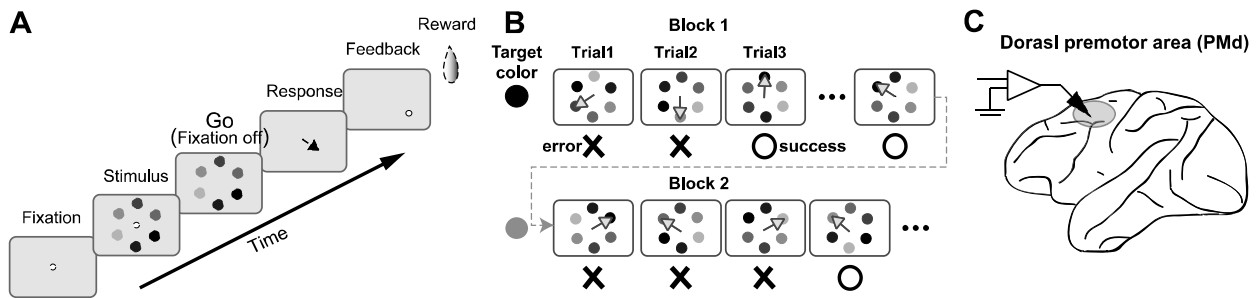
また、方略の切り替えを行っている神経機構の制御機能を状態遷移図で推定することにより、生体が示す知的振舞いの工学実現を支援するための基本的枠組みを与える。

## 2. 実験方法



**Figure 1. Trial-and-error search vs. knowledge-based solution.** Humans and animals can flexibly adapt to a changing environment, typically by switching two types of strategies (*trial-and-error search* vs. *knowledge-based solution*) conceptually analogous to the *exploration* vs. *exploitation* strategies in the field of machine learning.

未知の問題状況を繰り返して生じさせることが可能な「試行錯誤を伴う視覚探索課題」(Fig. 2)をサルに訓練した。課題では、スクリーンの中心点を注視すると、6つの異なる色刺激が呈示され、その中から目標である色刺激を選択しなければならない(選択可能なオプションが6つ存在することになる)。しかし



**Figure 2. Behavioral task and recording site.** **A.** Schematic flow of the target-tracking visual search task. After fixating the fixation spot for a while, a search array consisting of six differently colored elements was displayed. Because the monkey received no instruction about the target color, they had to search for the target color through trial-and-error actions. **B.** Block design paradigm of color changes. The target color was changed using a pseudo-randomized block design. A block consisted of 20–40 successful trials. **C.** Lateral view of the monkey brain and recording site. Single-unit activity was recorded from the dorsal part of the premotor area (PMd).

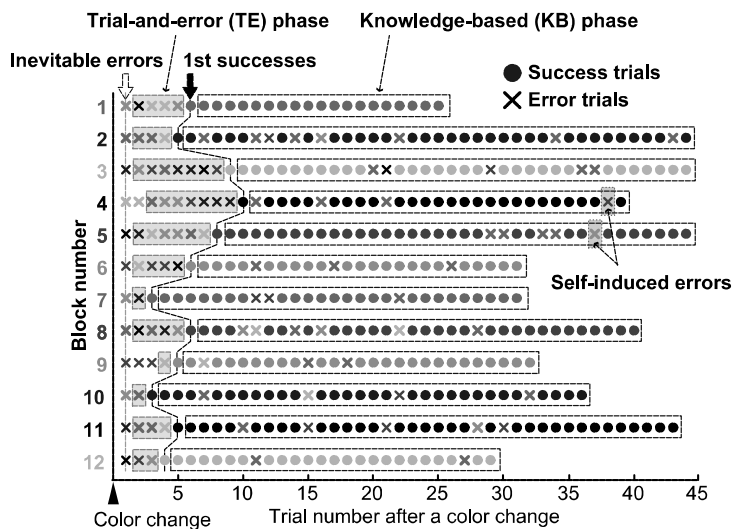
ながら、目標色は明示的に教示されないため、サルは選択した色とフィードバック（成功ならば報酬であるジュースが、失敗ならばブザー音が与えられる）を手掛かりとした試行錯誤によって目標色を探し必要がある。目標色が見出され、成功試行が続くようになると（20~40回の成功試行）、目標色が変更されて次の試行ブロックとなり、新たな問題状況が作り出される。なお、目標刺激の位置と色配列は試行ごとにランダムに変化するため、目標色以外の情報を用いて目標刺激を

選択することはできない実験条件となっている。

### 3. 実験結果（行動データの解析結果）

#### 3.1 試行錯誤による探索と知識による解決

Figure 3 は、サルから実際に記録された実験セッションの行動データを示す。横軸は目標色が更新されてからの試行数、縦軸は試行ブロック数を示す。図中では、異なる色刺激を異なるグレイレベルで表示している。



**Figure 3. An example of experimental sessions and trial classification.** The state of an individual trial is shown as a function of the number of trials after a color change. Numbers on the left side indicate block number and target color. The gray-level of each trial symbol indicates the color that the subject selected in that trial. The trial-and-error (TE) phase in each block was defined as the interval from the first erroneous trial after a color change (open arrow) to the first successful trial (filled arrow). The knowledge-based (KB) phase was defined as the interval from the trial following the first successful trial to the end of a block.

更新前の目標色を正しく選んでも失敗試行となる（不可避の失敗, inevitable error）。このような失敗を経験することによってサルは環境（目標色）の変化を検知し、新しい目標色を探索するため試行錯誤による目標色の探索を開始する（灰色領域の試行群, TE 期間）。TE 期間中は失敗試行が続くが、偶然に目標色を選択して成功試行となると（1st success）、新しい目標色の知識を得るため目標色を高確率で選択するようになる（黒枠領域内の試行群, KB 期間）。Figure 3 の結果から、未知の問題状況が繰り返し生じた場合、脳は「試行錯誤による探索（TE 期間）」と「知識による解決（KB 期間）」の2つの方略を適切に使い分けることによって問題解決を図ることが示された。

### 3.2 認知状態を反映する眼球運動特性

本行動課題のように高度な認知機能が処理される場合であっても、眼球運動の特性変化は脳内神経情報処理の状態を推し量る有効な指標になっていた。

Figure 4A で示された RTFP (reaction time to the fixation point) は、試行開始時に注視点が点灯してからサルが注視点に視線を向けるまでの反応時間であり、図から判断できるように TE 期間と KB 期間でステップ状に大きく変化するが、それぞれの期間内において一定の大きさを維持する傾向が観察された。

ステップ状の変化は方略の変換が試行間にわたって徐々に行なわれるのではなく、連続する2つの試行間内で変換が完了していることを意味する。このことから、方略変換のタイミングを脳が正確に制御していることが示唆される。また、TE 及び KB 期間内において RTFP の値が一定であることは、方略状態が連続

的に変化するものでなく、離散した状態を遷移するようなものであることを示唆する。

Figure 4B の SRT (saccadic reaction time) は刺激選択が要求される Go のタイミング (注視点消灯) から眼球運動が開始されるまでの反応時間であり、図から判断できるように TE 期間と KB 期間で大きな差異を示さない。しかしながら、KB 期間の失敗試行 (self-induced error) における SRT は、KB 期間の成功試行や TE 期間の失敗試行に比べて SRT が有意に短くなった。このことは self-induced error の試行では、他の試行とは異なる特異的な事態が生じていることを示唆する。

### 3.3 方略変更タイミングの検出と問題点

Figure 3 で示したように、「試行錯誤による探索 (TE 期間)」から「知識による解決 (KB 期間)」への変換は 1<sup>st</sup> success (open arrow) の直後に行なわれることが求められる。このとき TE 期間中の成功試行は 1<sup>st</sup> success 以外に存在しないため、TE 期間中の最初の成功試行を検出することによって方略変換の正しいタイミングを知ることができる。

これに対し、KB 期間から TE 期間への変換では問題が存在する。

Figure 3 から判断されるように、方略変換は inevitable error が生じた試行の後に行なわれれば良い。しかしながら、KB 期間中には inevitable error だけでなく、ケアレスミスなど自分自身の間違によって生じる失敗 (self-induced error) も存在する。いずれの失敗試行でも視覚刺激とフィードバックは同じであるため、外的情報を用いて2種類の失敗を区別することはできない。このため、脳は内的情報にもとづいて2種類の失敗を区別する必要がある。

### 3.4 眼球運動情報から失敗要因を特定する

脳はどのようにして2種類の失敗 (inevitable error vs. self-induced error) を区別しているのだろうか? 先に示した Figure 4B の結果は、self-induced

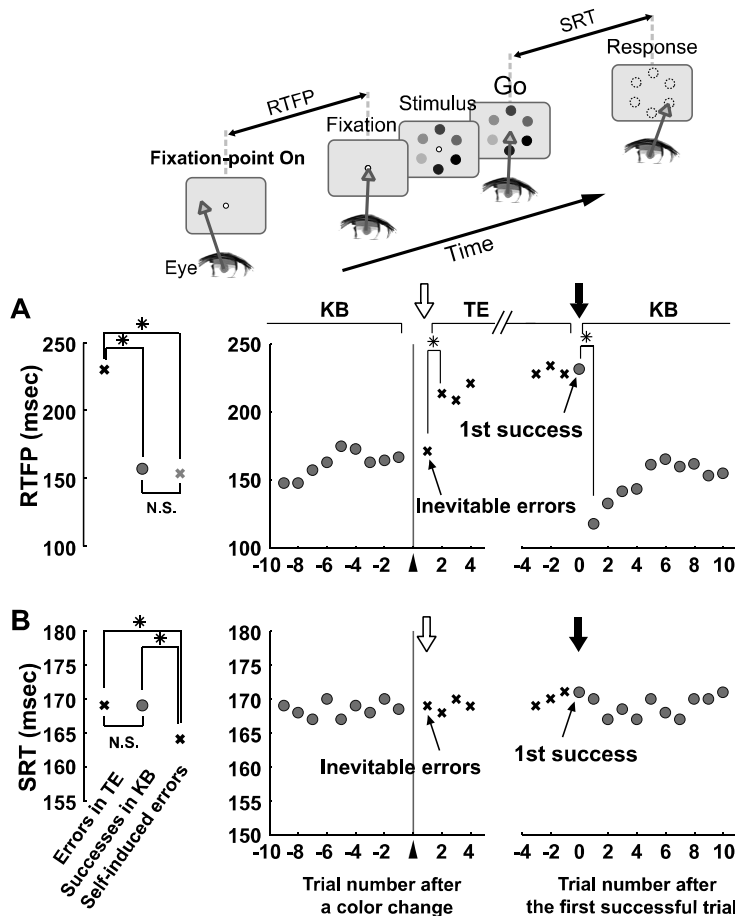
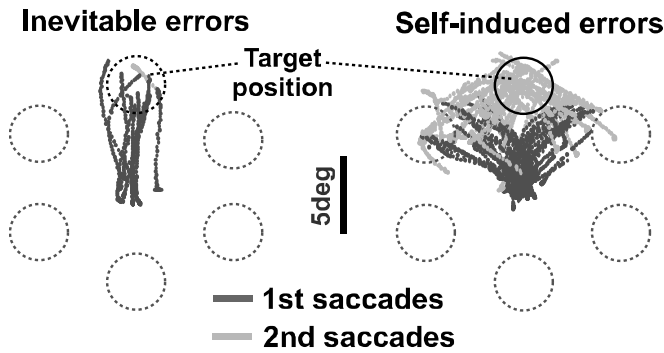


Figure 4. Changes in reaction time to the fixation point (RTFP) and saccadic reaction time (SRT) between the TE and KB phases.



**Figure 5. Saccadic eye movements in the inevitable and self-induced error trials.** For clarity, the target position is aligned in the upward direction. Dark and light gray dots indicate the eye movement traces in the 1st and 2nd saccadic eye movements. Note that in the self-induced error trials, the 2nd saccades directed to the target position, suggesting that the monkey precisely know the location of the target stimulus.

error の試行における特異的な事態の発生を示唆していた。この可能性を詳細に検討するため、inevitable error と self-induced error で計測された眼球運動を比較した。

Figure 5 はそれぞれの失敗試行で記録された眼球運動を複数試行にわたって重ねて描画したものである。課題では目標刺激の位置は試行ごとにランダムに変化しているが、図を見やすくするため目標刺激 (inevitable error では、前試行ブロックの目標刺激) の位置を上方で揃えている。図から判断されるように、inevitable error の試行では眼球運動 (サッカド眼球運動) が刺激に向かって真っ直ぐ変化しているのに対し、self-

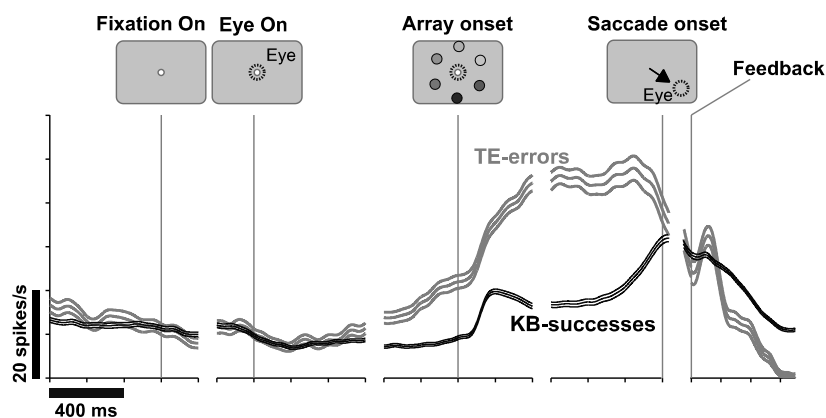
induced error の試行では一度間違った方向に移動してから正しい目標位置に向かっている。したがって、もし脳が眼球運動の違いを判断できたら、inevitable error と self-induced error を区別できる可能性がある。

実際、脳の高次中枢は眼球運動系の末端から眼球位置情報を受け、眼球がどのような運動を行ったかを体性感覚<sup>10</sup>や遠心性コピーを用いて常時モニターしている。このため、中枢から指示された空間位置に向かって眼球運動が正しく行なわれたにもかかわらず失敗試行となった場合は環境変動による失敗 (inevitable error) として、眼球運動が本来向かうべき空間位置とは異なった位置に向かって失敗試行となった場合は自己責任による失敗 (self-induced error) として判断することが可能だと考えられる。

## 4. 実験結果 (ニューロン活動データ)

### 4.1 方略状態を表現するニューロン活動

行動データの解析結果から、(1) 現在の方略状態 (試行錯誤による探索 or 知識による解決)、及び (2) 方略変換のタイミングが脳内で表現されている可能性が示された。さらに、(3) 適切な方略変換のためには、同じ失敗試行でも inevitable error と self-induced error を区別している必要性が示唆された。実際に、脳内でこれらの情報が表現されているのか、もし表現さ



**Figure 6. Activity of an example neuron during the target-tracking visual search task.** The activity in the ordinary successful trials during the KB phase (black traces) and the error trials during the TE phase (gray traces) is illustrated aligned on the time of fixation onset, eye onset, array onset, saccade onset, and the timing of the feedback signal presentation. This neuron discriminated whether the currently used strategy was trial-and-error search (TE phase) or knowledge-based solution (KB phase) by the sustained activity during the period from fixation onset to saccade onset.

れているのであれば、どのような表現形式であるのか？これらを明らかにするため、行動課題を遂行しているサルの前頭皮質から単一ニューロン活動を記録した。

代表的な活動を示した2つのニューロン例を挙げる。Figure 6 に最初ニューロン例を示す。このニューロンは試行錯誤による探索を遂行している期間 (TE phase, gray traces) と、知識による解決を遂行している期間 (KB phase, black traces) において活動強度に大きな差異を示した。しかしながら、方略変換のタイミングと関連する試行 (1st success, inevitable error, self-induced error) において特異的な活動は示さなかった。したがって、このニューロンの神経活動は、現在用いるべき方略の種類を表現し、その表現を試行間にわたって維持するために使役されていると考えられる。

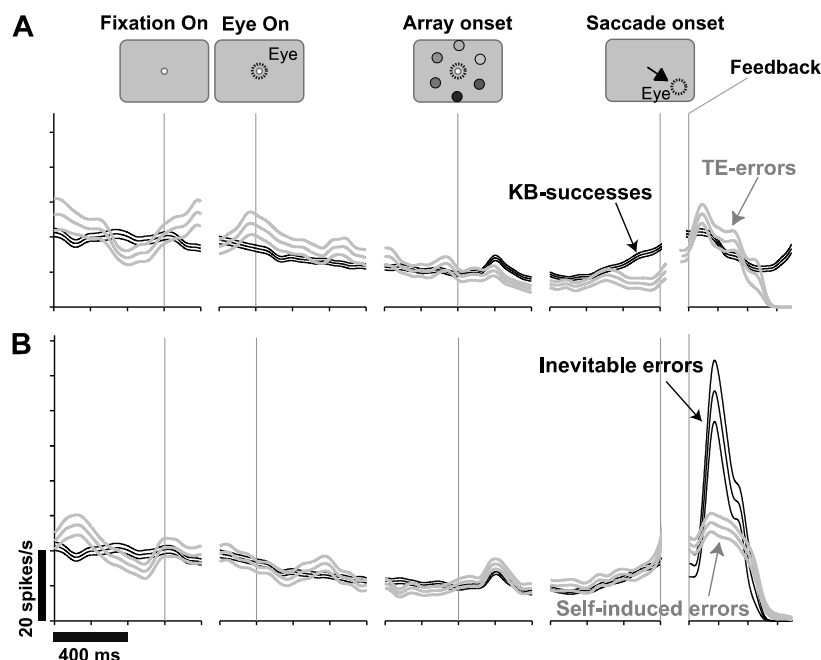
## 4.2 方略の変換タイミングを表現するニューロン活動

Figure 7 に次のニューロン例を示す。このニューロンは、方略の状態に対して顕著な選択性は示さなかつ

た (Fig. 7A) 。しかしながら、方略変換の重要なタイミングである inevitable error の試行において特異的な活動を示した。サルが目標色と誤っている色刺激に正しく眼球運動を行ったにもかかわらず、目標色の更新によって負のフィードバックが与えられた場合、このニューロンはフィードバック後に一過性の強い活動を示す (Fig. 7B, black traces) 。

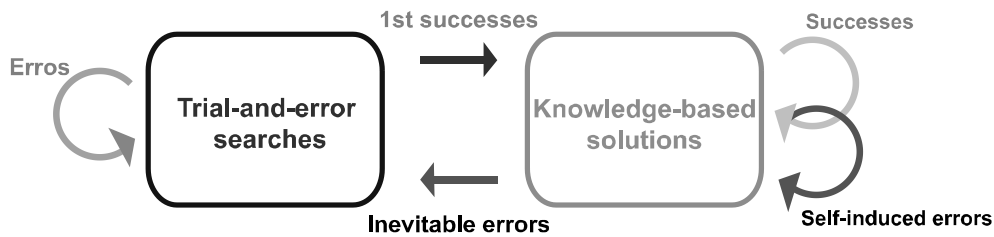
重要なことは、別の失敗試行：試行錯誤期間における失敗試行 (Fig. 7A, gray traces) や KB 期間の self-induced error (Fig. 7B, gray traces) では、そのような活動は見られないことである。このことは inevitable error 後の一過性活動がフィードバックの物理的信号によって生じられたものではなく、内的な情報 (例えば眼球運動情報) にもとづいて生み出されたものであることを意味する。このような神経活動は、「知識による解決方略」から「試行錯誤による探索方略」への変換タイミングを決める重要な信号を形成している可能性がある。

ここでは示さないが、1<sup>st</sup> success の試行において特異的な活動するニューロン群も見いだされた。したがっ



**Figure 7. Activity of another example neuron during the target-tracking visual search task.** This neuron didn't signal the state of the currently used strategy (trial-and-error search or knowledge-based solution). However, this neuron specifically discriminated the inevitable-error trials from the other error trials (self-induced errors and trial and errors), and signaled the detection timing by exhibiting a strong phasic activity after the feedback presentation.





**Figure 8. A state-transition diagram for possible neural mechanisms underlying flexible search strategy switching.** Two rectangles indicate the states of strategies (trial-and-error search or knowledge-based solution). Edges represent “transitions” either between two states or within a state caused by inputs labeled on each edge.

て、脳内には「試行錯誤による探索」と「知識による解決」のいずれ方向の変換であっても適切なタイミングを検出するためのニューロン群が存在している。

を進展させることによって、現実の脳機能（特にヒトの脳機能）を工学レベルで理解することをより容易にすると期待される。

## 5. 考察

本研究の行動データ及びニューロン活動データから、生体は「試行錯誤による探索」と「知識による解決」の2種類の方略を使い、それらを適切なタイミングで切り替えることによって変動環境における未知問題に対処していることが示された。「現在使用するべき方略の種類」と「方略を切替えるべきタイミング」は、工学的見地からは状態遷移図における「状態」と「状態遷移」と解釈することができる。Figure 8は2種類の方略を適切に切替えるための制御系を状態遷移図で構築したものである。適切な方略の使い分けのための制御系が簡単なシステム（すなわち、現実の神経細胞集団で実装可能な神経回路）で構築できることが理解される。

脳における制御系の特筆すべき特徴として、失敗要因に依存した方略変換（状態遷移）がある。コンピュータ内で計算される仮想的なシミュレーションの世界では、出力された命令が実行されないような状況は想定されていないかも知れない。しかしながら、現実の世界では例え正しい知識を持っていたとしても、間違いを犯すことがしばしばある（例えば、PCの起動時に入れるパスワードを正しく覚えているにもかかわらず、タイプミスでエラーとなるような状況）。脳には、そのような場合でも適切な行動がとれるような機能を有している（タイプミスなら同じパスワードを再入力する。しかしながら、パスワードを忘れたのであれば再発行してもらう）。本研究で示した実験パラダイム

## 参考文献

- 1) R.S. Sutton, A.G. Barto, Reinforcement Learning, MIT press, MA, 1998.
- 2) E. Hoshi, K. Shima, J. Tanji, Neuronal activity in the primate prefrontal cortex in the process of motor selection based on two behavioral rules, *Journal of Neurophysiology* 83, 2355–2373, 2000.
- 3) J.D. Wallis, K.C. Anderson, E.K. Miller, Single neurons in prefrontal cortex encode abstract rules, *Nature* 411: 953–956, 2001.
- 4) F.A. Mansouri, K. Tanaka, Behavioral evidence for working memory of sensory dimension in macaque monkeys, *Behavioral and Brain Sciences*, 136: 415–426, 2002.
- 5) Mansouri, F. A., M. J. Buckley, et al. Mnemonic function of the dorsolateral prefrontal cortex in conflict-induced behavioral adjustment. *Science*, 318: 987–990, 2007.
- 6) K. Nakahara, T. Hayashi, S. Konishi, Y. Miyashita, Functional MRI of macaque monkeys performing a cognitive set-shifting task, *Science*, 295: 1532–1536, 2002.
- 7) T. Kamigaki, T. Fukushima, Y. Miyashita, Cognitive set re-configuration signaled by macaque posterior parietal neurons, *Neuron*, 61: 941–951, 2009.
- 8) Fujimoto A, Nishida S, and Ogawa T\*. Dynamic alternation of primate response properties during trial-and-error knowledge updating. *Robotics and Autonomous Systems*, 60: 747–753, 2012.
- 9) Fujimoto A, Nishida S, and Ogawa T\*, Saccade Dynamics in Error Trials During Visual Search, In: *Advances in Cognitive Neurodynamics (III)*, Springer Dordrecht, 575–581 2013.
- 10) Wang, X., M. Zhang, et al.. The proprioceptive representation of eye position in monkey primary somatosensory cortex. *Nature Neuroscience*, 10: 640–6, 2007.

# リズム現象における周期感度の解析法

黒江康明 ○森禎弘 (京都工芸繊維大学)

## Analysis Method of Period Sensitivities in Rhythmic Phenomena

Y. Kuroe and \*Y. Mori (Kyoto Institute of Technology)

**Abstract**— Sensitivity analysis is fundamental and essential in analysis and design in any system. This paper discusses a method of sensitivity analysis of rhythmic phenomena which are found in various systems such as physical systems, biological systems and human societies and so on. In particular we propose an analysis method of period sensitivities in rhythmic phenomena. Analysis of period sensitivities is very difficult because rhythms appear autonomously as periodic phenomena in nonlinear systems and only few studies have been done. We first derive a strict expression of period sensitivities by introducing Poincaré map. Based on the expression we derive an efficient computer algorithm to calculate period sensitivities. It is shown that the proposed analysis method makes it possible to obtain period sensitivities of not only stable periodic orbits but also unstable periodic orbits embedded in chaos attracters.

**Key Words:** Rhythm phenomenon, Period sensitivity, Periodic orbit, Autonomous system, Nonlinear system, Poincaré map

### 1 はじめに

生体内では歩行運動や呼吸、心臓の鼓動などさまざまな周期的な運動、すなわちリズム現象が多く見られる。またサーカディアン・リズムとよばれる睡眠などの1日を周期とするリズム現象も存在する。これらのリズム現象は、生体内の特定のニューラルネットワークあるいは遺伝子ネットワークが司っていることが知られており、これらの現象の生理的および数理的な解明が盛んにされてきた。また工学の分野においてはこれらの結果に基づきリズム現象を工学的に実現し、応用する研究も行われるようになってきている。またリズム現象は生体内だけでなく、自然現象や物理現象、あるいは経済システム、社会システムなどありとあらゆるシステムみられ、これらの現象を数理的にモデリングしそのメカニズムを解明しようとする研究がさまざまな分野で行われるようになってきている。また、それらの成果を利用、あるいはそれらの成果にヒントを得て、システムの解析、設計における種々の問題の解決を図ろうというアプローチが最近注目され、コンピュータショナル・インテリジェンスにおける中心的なアプローチの1つとなっている。たとえば、複数の異なるリズム現象が相互に影響しあうとやがて一つのリズム現象に同期する同期現象と呼ばれる現象がさまざまな分野で見られ、この現象の解明に関する研究が盛んに行われている。これらの成果を自律分散制御やシステム創発的設計などに応用する研究も行われるようになってきている。

一方、システムのパラメータが微小変化したとき、システムの振る舞い、特性、性能がどのように変化するかを調べることは、すなわち感度解析は、システムの解析、設計におけるさまざまな場面で必要となり、あらゆるシステムにとって非常に重要な問題である。システムの振る舞い、特性、性能パラメータに関する感度は、通常、それらのパラメータに関する微分として定義される。また、システムの性能や応答に対する評価関数が与えられ、それを最小あるいは最大にするようなパラメータを求める最適化問題において、この問題を勾配法など種々開発されている最適化アルゴリ

ズムを用いて解く際、評価関数のパラメータに関する微分値が必要となり、この場合も感度解析が必要となる。本稿の目的は、リズムを対象としてその感度解析法について議論し、特に、リズムの周期のパラメータに関する感度を求める方法を提案することである。リズム現象において周期は基本的で重要な要素で、周期感度の解析が可能となると、先に述べたリズム現象の工学的応用に関する研究の推進に資するところが大きいと考えられる。

システムの感度解析の研究は古くからなされ、これまで多くの研究がある。ところがリズム現象、すなわち周期現象に関する感度の研究はそれほど多くない。その理由は、システムにおける周期解は一般に初期状態には依存しない非線形現象の定常状態として自律的に決まり、そのパラメータの依存性の表現を得ることが困難なためである。周期現象の感度に関してこれまでいくつかの研究があるが<sup>1, 2, 3)</sup>、近似的な扱いが含まれる、その具体的な計算法が示されていない、計算効率が考慮されていないというような問題がある。

リズム現象は通常、非線形自律システムの周期解としてモデル化される。そこで、本稿では非線形自律システムを対象として、まず、その周期解の周期に関するパラメータ感度の表現を導出する。この導出において対象とする周期解にポアンカレ写像を定義し、周期解がポアンカレ写像の不動点に対応しているという事実を用いており、得られた感度の表現は、数学的に厳密な表現となっている。このような非線形現象の感度は、解析的に求めることがほとんど不可能で最終的には数値的に求めることになり、その際、計算精度および計算効率が問題となる。そのため本稿では、導いた周期感度の表現より、感度を数値的に計算するための精度が良くかつ計算効率の良いアルゴリズムを提案する。提案する方法は、通常、リズム現象を構成する安定なリミットサイクルの周期感度だけでなく、たとえばカオスアトラクターに埋め込まれた不安定なリミットサイクルの周期感度も求めることができる方法となっている。

## 2 問題の記述と数学的準備

本稿で取り扱うリズム現象は、次の一般的な微分方程式で表される非線形自律システムの周期解としてモデル化できるものを対象とする。

$$\frac{d}{dt}\mathbf{x}(t) = \mathbf{f}(\mathbf{x}(t), \mathbf{p}) \quad (1)$$

ここで、 $\mathbf{x}(t)$  は状態ベクトル、 $\mathbf{p}$  はパラメータベクトルであり、それぞれ  $n$  次元ベクトル ( $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ )、 $p$  次元ベクトル ( $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^p$ ) であるとする。 $\mathbf{f}$  は非線形のベクトル関数である ( $\mathbf{f}: \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^p \rightarrow \mathbb{R}^n$ )。  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  は、 $\mathbf{x}$  および  $\mathbf{p}$  に関してそれぞれ 1 階連続微分可能とする。また、 $\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})$  を初期条件  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_0$  としたときの、(1) 式で表されるシステムの時刻  $t$  での解とする。 $\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})$  は、次式を満たす。

$$\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) = \mathbf{x}_0 + \int_0^t \mathbf{f}(\phi(\tau, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}), \mathbf{p}) d\tau \quad (2)$$

ここで、(1) 式のシステムは、非自明な孤立した周期解、すなわちリミットサイクルを持つと仮定し、これがリズム現象を実現しているものとする。この周期解の状態空間における軌道を  $\gamma$  とし、この軌道上の一点を  $\mathbf{x}_\gamma$  とする。 $\gamma$  が周期軌道であるということより、任意の点  $\mathbf{x}_\gamma \in \gamma$  に対し、

$$\mathbf{x}_\gamma = \phi(T, \mathbf{x}_\gamma, \mathbf{p}) \quad (3)$$

がすべての時刻  $t$  で成立する。ここで、 $T$  は周期解の周期である。周期  $T$  はシステムのパラメータ  $\mathbf{p}$  に依存して決まり、本稿の目的は、周期  $T$  のパラメータ  $\mathbf{p}$  に関する感度を  $\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}}$  と定義し、これを求める方法を提案することである。

以下では、周期感度を求めるため、いくつかの数学的な準備を与える。システムの周期解の定性的な性質や安定性を解析するための重要なツールとしてポアンカレ写像 (Poincaré Map) が知られている<sup>4, 5)</sup>。ポアンカレ写像の基本的な考え方は、連続時間システムの周期軌道の解析を、それより 1 次元低い離散時間システムに置き換えて解析することであり、次のように定義される。

【ポアンカレ写像の定義】

周期解の軌道を  $\gamma$  とする。 $\gamma$  上の一点を  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  とし、この点で  $\gamma$  と横断的に交わる超平面 (曲面)  $\Sigma$  を考える。 $U \subset \Sigma$  を点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  の近傍とする。点  $\mathbf{x} \in U$  に対して

$$\mathbf{P}(\mathbf{x}) = \phi(T, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \quad (4)$$

で定義される写像  $\mathbf{P}: U \rightarrow \Sigma$  をポアンカレ写像とよぶ。ただし  $T(\mathbf{x})$  は点  $\mathbf{x}$  から出発した解軌道  $\phi(t, \mathbf{x}, \mathbf{p})$  が最初に  $\Sigma$  にもどってくる時刻である。すなわち、 $T(\mathbf{x}) = \min\{t | \phi(t, \mathbf{x}, \mathbf{p}) \in \Sigma\}$  である。

明らかに、 $\mathbf{x}_{\gamma_0} = \mathbf{P}(\mathbf{x}_{\gamma_0})$ 、 $T(\mathbf{x}_{\gamma_0}) = T$  が成立し、周期軌道上の点は、ポアンカレ写像の不動点となる。

周期軌道に対し、上記の様に定義されるポアンカレ写像を導入することにより、周期軌道  $\gamma$  の近傍での解の振る舞いの定性的な性質を調べることができる。特に、周期軌道の近傍での安定性がしばしば問題となる。周期軌道の安定性に関する理論として次のことが知られている<sup>5)</sup>。

【周期軌道の安定性】

$\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})$  の初期状態  $\mathbf{x}_0$  に関するヤコビ行列を  $D\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})$  とする。すなわち

$$D\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) = \frac{\partial \phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})}{\partial \mathbf{x}_0}$$

とする。このとき、 $D\phi(T, \mathbf{x}_\gamma, \mathbf{p})$  は、必ず値が 1 の固有値を 1 つもち、残りの  $n-1$  個の固有値の絶対値がすべて 1 より小さいならば、周期軌道  $\gamma$  は漸近安定である。

## 3 周期感度の解析法

### 3.1 周期感度の表現の導出

ここでは、周期感度の数学的に厳密な表現を、周期軌道の 1 点がポアンカレ写像の不動点になることを利用して導出する。ポアンカレ断面と呼ばれる超平面  $\Sigma$  は次式で表されるとする。

$$\sigma(\mathbf{x}) = 0 \quad (5)$$

ここで、 $\sigma: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  なる写像である。対象とする周期軌道  $\gamma$  に対し、ポアンカレ断面は適切に設定できるとし、 $\sigma(\mathbf{x})$  は既知であるとする。周期軌道とポアンカレ断面の交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  は (3) 式を満たすので、次式が成立する。

$$\mathbf{x}_{\gamma_0} = \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \quad (6)$$

また  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  は  $\Sigma$  上の点であることから

$$\sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) = 0 \quad (7)$$

が成立する。

今システムのパラメータが  $\mathbf{p}$  から  $\Delta \mathbf{p}$  だけ変動して  $\mathbf{p} + \Delta \mathbf{p}$  となったとする。このとき周期軌道  $\gamma$  は周期状態を維持したまま、 $\Sigma$  との交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と周期がそれぞれ

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{\gamma_0} + \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} \\ T + \Delta T \end{aligned}$$

となったとする。すなわち次式が成立するとする。

$$\mathbf{x}_{\gamma_0} + \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} = \phi(T + \Delta T, \mathbf{x}_{\gamma_0} + \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p} + \Delta \mathbf{p}) \quad (8)$$

また  $\mathbf{x}_{\gamma_0} + \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0}$  は  $\Sigma$  上の点なので次式が成立する。

$$\sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0} + \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0}) = 0 \quad (9)$$

(8) 式の右辺をテーラー展開することにより

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{\gamma_0} + \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} &= \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) + \frac{\partial}{\partial t} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta T \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta \mathbf{p} + O(\Delta^2) \end{aligned}$$

が得られ、この式に (6) 式を用いることにより、

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} &= \frac{\partial}{\partial t} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta T + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta \mathbf{p} + O(\Delta^2) \end{aligned}$$

が得られる。この式を  $\Delta T$  と  $\Delta \mathbf{x}_{\gamma_0}$  を未知数とする方程式として整理すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} & \left( \mathbf{I} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \right) \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} - \frac{\partial}{\partial t} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta T \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \Delta \mathbf{p} + O(\Delta^2) \end{aligned} \quad (10)$$

一方、(9) 式の左辺をテーラー展開することにより

$$\sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) + \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} + O(\Delta^2) = 0$$

が得られる。この式に (7) 式を用いると

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} + O(\Delta^2) = 0 \quad (11)$$

が得られる。(10) 式と (11) 式を  $\Delta T$  と  $\Delta \mathbf{x}_{\gamma_0}$  を未知数とする方程式としてを連立させると、最終的に次式が得られる。

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) & -\frac{\partial}{\partial t} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} \\ \Delta T \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \\ 0 \end{bmatrix} \Delta \mathbf{p} + O(\Delta^2) \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、記述の簡単のため

$$\begin{aligned} \mathbf{S} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) & -\frac{\partial}{\partial t} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) & 0 \end{bmatrix} \\ \mathbf{V} &= \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \\ 0 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

とおくと、(12) 式は次式のように表される。

$$\mathbf{S} \begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} \\ \Delta T \end{bmatrix} = \mathbf{V} \Delta \mathbf{p} + O(\Delta^2) \quad (13)$$

この方程式を解くことにより、次式が得られる。

$$\begin{bmatrix} \Delta \mathbf{x}_{\gamma_0} \\ \Delta T \end{bmatrix} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{V} \Delta \mathbf{p} + O(\Delta^2) \quad (14)$$

この式より、周期軌道とポアンカレ断面  $\Sigma$  の交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と周期  $T$  のパラメータベクトル  $\mathbf{p}$  に関する感度はそれぞれ、次のように求めることができる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial x_{\gamma_0 j}}{\partial p_i} &= \{ \mathbf{S}^{-1} \mathbf{V} \text{ の } j \text{ 行 } i \text{ 列要素} \} \\ \frac{\partial T}{\partial p_i} &= \{ \mathbf{S}^{-1} \mathbf{V} \text{ の } (n+1) \text{ 行 } i \text{ 列要素} \} \end{aligned}$$

これらの感度を求めるためには、行列  $\mathbf{S}$  および  $\mathbf{V}$  の各要素を求める必要があり、これらをいかに精度よく、かつ効率よく計算するかが問題となる。次項ではこのための計算アルゴリズムを導出する。

## 3.2 感度計算アルゴリズム

### 3.2.1 周期解の求解法

前項で導いた (14) 式の行列  $\mathbf{S}$  および  $\mathbf{V}$  を求めるためには、まず周期軌道  $\gamma$  を求める必要がある。これを

求めるためには、通常、システムのモデルである微分方程式 (1) を、適当な初期条件を与えて解くことが行われる。実際、周期軌道の吸引領域 (アトラクター) に初期条件を選ぶことができると、(1) 式を定常状態まで解くことにより、周期解が得られる。ところがこの方法であると、理論的には  $t \rightarrow \infty$  の極限として周期解が得られるので、非常に時間がかかることになり計算効率が悪い。また、実際には周期状態に近づいたとみなせる時間で求解を打ち切ることになるので、求めた周期解の精度が問題となり、この問題は感度の計算の精度に大きな影響を及ぼす。さらに、この方法は安定な周期解にしか適用できず、たとえばカオスアトラクターに埋め込まれた不安定な周期解の求解には用いることができない。以下では、これらの問題を考慮した周期解の求解法について説明する。

(6) 式と (7) 式は  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と  $T$  に関する代数方程式ととらえることができるので、 $\mathbf{y} = [\mathbf{x}'_{\gamma_0} \ T]'$  とおき

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \mathbf{0}$$

なる代数方程式を考える。ただし

$$\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} \mathbf{x}_{\gamma_0} - \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \\ \sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) \end{bmatrix} \quad (15)$$

で、 $\mathbf{A}'(\mathbf{x}')$  は行列  $\mathbf{A}$  (ベクトル  $\mathbf{x}$ ) を転置したものである。この代数方程式をニュートン法で解くことにするとその反復計算式は次の様に表される。

$$\mathbf{y}^{i+1} = \mathbf{y}^i - D\mathbf{F}(\mathbf{y}^i)^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{y}^i) \quad (16)$$

ただし  $D\mathbf{F}(\mathbf{y})$  は  $\mathbf{F}(\mathbf{y})$  の  $\mathbf{y}$  に関するヤコビ行列で、次のように表される。

$$D\mathbf{F}(\mathbf{y}) = \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) & -\frac{\partial}{\partial T} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}) \\ \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}) & 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

(16) 式のニュートン法の反復計算において  $\mathbf{F}(\mathbf{y}^i)$  および  $D\mathbf{F}(\mathbf{y}^i)$  を適切に計算する必要がある。

$\mathbf{F}(\mathbf{y}^i)$  の第 1 項  $\phi(T^i, \mathbf{x}_{\gamma_0}^i, \mathbf{p})$  は、初期条件を  $\mathbf{x}(0) = \mathbf{x}_{\gamma_0}^i$  とし (1) 式を  $t=0$  から  $t=T^i$  まで解くことにより得られる。第 2 項  $\sigma(\mathbf{x}_{\gamma_0}^i)$  は、ポアンカレ断面の (5) 式は既知としているので計算できる。

ヤコビ行列  $D\mathbf{F}(\mathbf{y}^i)$  の (1,1) ブロックの中の  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T^i, \mathbf{x}_{\gamma_0}^i, \mathbf{p})$  は、次のように計算できる。(2) 式の両辺を  $\mathbf{x}_0$  で微分すると、

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) \\ &= \mathbf{I} + \int_0^t \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\phi(\tau, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}), \mathbf{p}) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(\tau, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) d\tau \end{aligned} \quad (18)$$

が得られる。ここで  $\mathbf{z}_{x_0}(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})$  とおくと  $\mathbf{z}_{x_0}(t)$  は次式を満たすことが容易にわかる。

$$\frac{d}{dt} \mathbf{z}_{x_0}(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}), \mathbf{p}) \mathbf{z}_{x_0}(t), \quad \mathbf{z}_{x_0}(0) = \mathbf{I} \quad (19)$$

ここで、 $\mathbf{I}$  は単位行列である。従って  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T^i, \mathbf{x}_{\gamma_0}^i, \mathbf{p})$  は、次式の感度方程式と呼ばれる微分方程式を、 $t=0$  から  $t=T^i$  まで解いたときの解  $\mathbf{z}_{x_0}(T^i)$  として求まる。

$$\frac{d}{dt} \mathbf{z}_{x_0}(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{x}_0^i, \mathbf{p}), \mathbf{p}) \mathbf{z}_{x_0}(t), \quad \mathbf{z}_{x_0}(0) = \mathbf{I} \quad (20)$$

またヤコビ行列  $D\mathbf{F}(\mathbf{y}^i)$  の (1,2) ブロックの  $\frac{\partial}{\partial T} \phi(T^i, \mathbf{x}_{\gamma_0}^i, \mathbf{p})$  は、

$$\frac{\partial}{\partial T} \phi(T^i, \mathbf{x}_{\gamma_0}^i, \mathbf{p}) = \mathbf{f}(\phi(T^i, \mathbf{x}_{\gamma_0}^i, \mathbf{p}))$$

より、この式の右辺を計算することにより求まる。

以上により (16) 式のニュートン法の反復計算を進めることができ、ニュートン法が収束すると、ポアンカレ断面と周期軌道の交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と周期  $T$ 、および周期軌道  $\phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$ ,  $0 \leq t \leq T$  が求まることになる。

なお、ニュートン法を実行するためには、(1) 式の対象のシステムの方程式と (20) 式の感度方程式を時刻  $t=0$  から  $t=T^i$  まで解く必要がある。また、感度方程式を解く際、対象のシステムの解  $\phi(t, \mathbf{x}_0^i, \mathbf{p})$  が必要となり、これは、システムの方程式を解いた結果を保存しておき、これを利用することになる。ところが、システムの方程式と感度方程式は連立して同時に解くことができ、こうすることによりシステムの解  $\phi(t, \mathbf{x}_0^i, \mathbf{p})$  を  $t=0$  から  $t=T^i$  まで保存する必要はなくなり、メモリーを節約することができる。

なお、以上で説明した周期解の求解法は、安定なりミットサイクルだけでなく、たとえばカオスに埋め込まれた不安定なりミットサイクルも求められる方法となっている<sup>6)</sup>。

### 3.2.2 行列 $\mathbf{S}$ と $\mathbf{V}$ の要素の計算法

(14) 式の行列  $\mathbf{S}$  の (1,1) ブロック内の  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  は次のように求めることができる。  $\mathbf{z}_{x_0}(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p})$  とおくと、(20) 式と同様の考え方で、感度方程式

$$\frac{d}{dt} \mathbf{z}_{x_0}(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}), \mathbf{p}) \mathbf{z}_{x_0}(t), \quad \mathbf{z}_{x_0}(0) = \mathbf{I} \quad (21)$$

を導ける。したがって、 $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  は、この感度方程式を  $t=0$  から  $t=T$  まで解いたときの解  $\mathbf{z}_{x_0}(T)$  として求まる。ここで、(16) 式のニュートン法が収束した際、 $\mathbf{x}_{\gamma_0}^i \rightarrow \mathbf{x}_{\gamma_0}$ ,  $T^i \rightarrow T$  となるので、(20) 式の感度方程式は (21) 式の感度方程式と一致する。したがって  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  の値は (16) 式のニュートン法が収束した際に (20) 式の解としてすでに求まっているので、(21) 式をあらためて解く必要はない。

また、行列  $\mathbf{V}$  の第 1 ブロック  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(T, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  は、 $\mathbf{z}_p(t) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_0} \phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  とおくと、感度方程式

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbf{z}_p(t) &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}), \mathbf{p}) \mathbf{z}_p(t) \\ &+ \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \mathbf{f}(\phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p}), \mathbf{p}), \quad \mathbf{z}_p(0) = \mathbf{0} \end{aligned}$$

を導くことができ、これを  $t=0$  から  $t=T$  まで解いたときの解  $\mathbf{z}_p(T)$  として求まる。この感度方程式を解く際も、対象のシステムの解  $\phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  が必要となる

Table 1: Sensitivities for the periodic orbit of (23) obtained by the proposed method and the true values of sensitivities

	Proposed method	True values
$\frac{\partial T}{\partial p_1}$	-6.28318	$-2\pi$
$\frac{\partial T}{\partial p_2}$	$2.05188 \times 10^{-6}$	0
$\frac{\partial x_{\gamma_0 1}}{\partial p_1}$	$3.25560 \times 10^{-8}$	0
$\frac{\partial x_{\gamma_0 1}}{\partial p_2}$	0.50000	0.5
$\frac{\partial x_{\gamma_0 2}}{\partial p_1}$	0.00000	0
$\frac{\partial x_{\gamma_0 2}}{\partial p_2}$	0.00000	0

が、システムの方程式とこの感度方程式は連立して同時に解くことができ、こうすることによりシステムの解  $\phi(t, \mathbf{x}_{\gamma_0}, \mathbf{p})$  を  $t=0$  から  $t=T$  まで保存する必要はなくなり、メモリーを節約することができる。

## 4 周期感度の計算例

本節では、提案法によって周期感度を求めた計算例を 3 つ示す。1 つ目の例は、提案法の精度を厳密に評価するため、周期感度の真値を解析的に求めることができる 2 次のシステムを対象とする。2 つ目の例は、3 次のシステムを対象とする。この場合、周期感度を解析的に求めることは困難であるため、差分法により近似的に感度を求め、提案法で求めた結果と比較して提案法の妥当性を示す。先に述べたように、提案法は不安定なりミットサイクルの周期感度を求めることができる。3 つ目の例はカオスアトラクターに埋め込まれた不安定なりミットサイクルの感度を提案法により求めた結果を示す。

### 4.1 周期感度が解析的に求められる例

ここでは、解析的に求めた周期感度の真値と比較することで提案法の精度を厳密に評価する。対象とするシステムは次式で与えられるとし、

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} x_1(t) = p_2 x_1(t) - p_1 x_2(t) - (x_1^2(t) + x_2^2(t)) x_1(t) \\ \frac{d}{dt} x_2(t) = p_1 x_1(t) + p_2 x_2(t) - (x_1^2(t) + x_2^2(t)) x_2(t) \end{cases} \quad (22)$$

パラメータ  $\mathbf{p} = [p_1 \ p_2]'$  は、 $\mathbf{p} = [1.0 \ 1.0]'$  とする。

$p_1 \neq 0$ ,  $p_2 > 0$  のとき、(22) 式のシステムの  $x_0 = [\sqrt{p_2} \ 0]'$  から始まる解は

$$\begin{cases} \phi_1(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) = \sqrt{p_2} \cos(p_1 t) \\ \phi_2(t, \mathbf{x}_0, \mathbf{p}) = \sqrt{p_2} \sin(p_1 t) \end{cases} \quad (23)$$

と表され、周期  $\frac{2\pi}{p_1}$  の周期軌道となる。これより、周期感度は  $\frac{\partial T}{\partial \mathbf{p}} = \left[ -\frac{2\pi}{(p_1)^2} \ 0 \right]$ 、ポアンカレ断面  $\Sigma$  を  $\sigma(\mathbf{x}) =$

$$x_2 = 0 \text{ としたときの交点の感度は } \frac{\partial \mathbf{x}_{\gamma_0}}{\partial \mathbf{p}} = \begin{bmatrix} 0 & \frac{1}{2\sqrt{p_2}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

と求められる。

ポアンカレ断面  $\Sigma$  を  $\sigma(\mathbf{x}) = x_2 = 0$  として 3.2.1 節で説明したニュートン法により周期軌道のポアンカレ断面  $\Sigma$  との交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と周期  $T$  を求めると、 $\mathbf{x}_{\gamma_0} = [1.00000 \ 0.00000]'$ ,  $T = 6.28318$  と得られた。求められた周期軌道について提案法により求められた感度と解析的に求めた感度の真値を Table 1 に示す。それらの値は一致しており、提案法で正しく感度が求められていることがわかる。

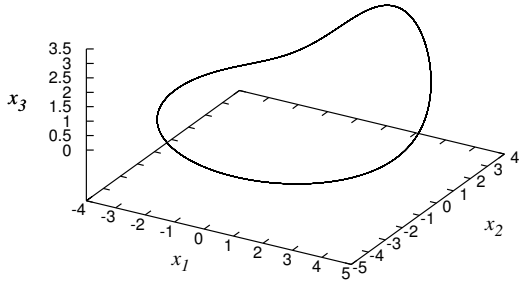


Fig. 1: A stable limit cycle of Rössler system (24)

#### 4.2 安定なリミットサイクルの例

ここでは、3次のシステムがもつ安定なリミットサイクルの感度の計算結果を示す。対象とするシステムは、Rössler System と呼ばれる次式で表されるシステムである<sup>7)</sup>。

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}x_1(t) = -x_2(t) - x_3(t) \\ \frac{d}{dt}x_2(t) = x_1(t) + p_1x_2(t) \\ \frac{d}{dt}x_3(t) = p_2 + x_3(t)(x_1(t) - p_3) \end{cases} \quad (24)$$

このシステムは、パラメータ  $\mathbf{p} = [p_1 \ p_2 \ p_3]'$  の値により、カオスを発生することが知られている<sup>7)</sup>。ここでは、まず安定なリミットサイクルをもつ場合を対象とする。パラメータ  $\mathbf{p}$  は、 $\mathbf{p} = [0.2 \ 0.2 \ 2.6]'$  とする。また、 $\sigma(\mathbf{x}) = x_3 - 1.0 = 0$  をポアンカレ断面  $\Sigma_a$  とする。

3.2.1 節で説明したニュートン法により周期軌道のポアンカレ断面  $\Sigma_a$  との交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と周期  $T$  を求めると、それぞれ  $\mathbf{x}_{\gamma_0} = [4.893635 \ -0.8806169 \ 1.000000]'$ 、 $T = 5.755597$  と得られた。Fig. 1 に求められた周期解軌道を示す。また、このときに得られたヤコビ行列  $D\phi$  は、

$$D\phi = \begin{bmatrix} 0.5442572 & 0.8590171 & -1.646925 \\ 0.9554855 & -0.05122298 & 2.034469 \\ 1.007236 & 0.7306589 & -0.3340543 \end{bmatrix}$$

で、その固有値は、 $[1.000000, -2.663303 \times 10^{-6}, -0.8410171]$  であった。したがって、求められた周期解は安定なリミットサイクルであると判別できる。

求められた安定なリミットサイクルの周期感度を提案法により求めた結果を Table 2 に示す。提案法ではポアンカレ断面との交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  のパラメータ  $\mathbf{p}$  に関する感度  $\frac{\partial \mathbf{x}_{\gamma_0}}{\partial \mathbf{p}}$  も同時に求められるので、Table 2 にはその計算結果も示している。

(24) 式のシステムに対して、周期軌道の周期を解析的に求めることは困難である。そこで、提案法の結果の妥当性を検証するために、差分法により近似的に求めた感度と比較する。 $p_i, i = 1, 2, 3$  をそれぞれ  $\Delta p_i = 0.01, 0.001$  だけ変化させたときの周期  $\tilde{T}$  とポアンカレ断面との交点  $\tilde{\mathbf{x}}_{\gamma_0}$  を 3.2.1 節で説明したニュートン法で求め、次式

Table 2: Sensitivities of stable limit cycle obtained by the proposed method and the difference method at  $\Sigma_a$

	Proposed method	Difference method	
		$\Delta p_i = 0.01$	$\Delta p_i = 0.001$
$\frac{\partial T}{\partial p_1}$	-2.638838	-2.618408	-2.636909
$\frac{\partial T}{\partial p_2}$	0.9919101	0.9716511	0.9899139
$\frac{\partial T}{\partial p_3}$	0.06447446	0.06432533	0.06437301
$\frac{\partial x_{\gamma_0^1}}{\partial p_1}$	6.493772	6.227350	6.465912
$\frac{\partial x_{\gamma_0^1}}{\partial p_2}$	-6.387487	-6.266880	-6.374836
$\frac{\partial x_{\gamma_0^1}}{\partial p_3}$	1.612144	1.611233	1.612663
$\frac{\partial x_{\gamma_0^2}}{\partial p_1}$	-11.57510	-11.23933	-11.54023
$\frac{\partial x_{\gamma_0^2}}{\partial p_2}$	-1.174448	-1.133287	-1.170218
$\frac{\partial x_{\gamma_0^2}}{\partial p_3}$	-0.4977688	-0.4974902	-0.4978180
$\frac{\partial x_{\gamma_0^3}}{\partial p_1}$	0.000000	0.000000	0.000000
$\frac{\partial x_{\gamma_0^3}}{\partial p_2}$	0.000000	0.000000	0.000000
$\frac{\partial x_{\gamma_0^3}}{\partial p_3}$	0.000000	0.000000	0.000000

Table 3: Sensitivities of stable limit cycle obtained by the proposed method at different Poincaré sections

	$\Sigma_a$	$\Sigma_b$	$\Sigma_c$
$\frac{\partial T}{\partial p_1}$	-2.638838	-2.638838	-2.638841
$\frac{\partial T}{\partial p_2}$	0.9919101	0.9919102	0.9919108
$\frac{\partial T}{\partial p_3}$	0.06447446	0.06447446	0.06447455

の周期感度と交点の感度の近似値  $\frac{\Delta T}{\Delta p_i}$ ,  $\frac{\Delta x_{\gamma_0^i}}{\Delta p_i}$  を求める。

$$\frac{\Delta T}{\Delta p_i} = \frac{\tilde{T} - T}{\Delta p_i}, \quad i = 1, 2, 3 \quad (25)$$

$$\frac{\Delta x_{\gamma_0^i}}{\Delta p_j} = \frac{\tilde{x}_{\gamma_0^i} - x_{\gamma_0^i}}{\Delta p_j}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (26)$$

これらの値を Table 2 に示す。Table 2 より、提案法による計算結果は妥当であると確認できる。

提案法は、ポアンカレ断面を設定して感度を計算する方法であるが、周期感度はポアンカレ断面をどのようにとっても同じ値が得られる。このことを確かめるため、ポアンカレ断面を変えて周期感度を求めた。ポアンカレ断面を  $\Sigma_b: \sigma(\mathbf{x}) = x_2 + 1.0 = 0$  とした場合、 $\Sigma_c: \sigma(\mathbf{x}) = -x_1 - x_2 + x_3 + 1.3 = 0$  とした場合の計算結果を Table 3 に示す。この表より、提案法で得られた周期感度がポアンカレ断面によらず同じであることがわかる。

#### 4.3 不安定なリミットサイクルの例

ここでは、カオスアトラクターに埋め込まれた不安定なリミットサイクルについて感度を求めた結果を示す。対象とするシステムは、(24) 式の Rössler System である。パラメータ  $\mathbf{p}$  を  $\mathbf{p} = [0.2 \ 0.2 \ 5.8]'$  とする。このとき、このシステムは Fig. 2 に示すようなカオスアトラクターをもつ。カオスアトラクターには無限個の不安定なリミットサイクルが埋め込まれていることが知られている。そこで、そのうちの1つを 3.2.1 節で説明したニュートン法により求め、その周期感度を提案法により求める。 $\sigma(\mathbf{x}) = x_1 - 7.0 = 0$  をポアンカレ断面  $\Sigma_a$  とする。

ニュートン法により周期軌道のポアンカレ断面  $\Sigma_a$  との交点  $\mathbf{x}_{\gamma_0}$  と周期  $T$  の値を求めると、それぞれ  $\mathbf{x}_{\gamma_0} =$

Table 4: Sensitivities of unstable limit cycle obtained by the proposed method and difference method at  $\Sigma_a$

	Proposed method	Difference method	
		$\Delta p_i = 0.01$	$\Delta p_i = 0.001$
$\frac{\partial T}{\partial p_1}$	-1.553529	-1.525259	-1.550674
$\frac{\partial T}{\partial p_2}$	0.5276283	0.5172253	0.5264282
$\frac{\partial T}{\partial p_3}$	0.02702760	0.02698898	0.02717972
$\frac{\partial x_{\gamma_0 1}}{\partial p_1}$	0.000000	0.000000	0.000000
$\frac{\partial x_{\gamma_0 1}}{\partial p_2}$	0.000000	0.000000	0.000000
$\frac{\partial x_{\gamma_0 1}}{\partial p_3}$	0.000000	0.000000	0.000000
$\frac{\partial x_{\gamma_0 2}}{\partial p_1}$	-5.348279	-5.494094	-5.363464
$\frac{\partial x_{\gamma_0 2}}{\partial p_2}$	-6.395152	-6.287170	-6.383896
$\frac{\partial x_{\gamma_0 2}}{\partial p_3}$	1.1714784	1.169944	1.171350
$\frac{\partial x_{\gamma_0 3}}{\partial p_1}$	39.59606	39.41660	39.57891
$\frac{\partial x_{\gamma_0 3}}{\partial p_2}$	-11.44922	-11.14445	-11.41787
$\frac{\partial x_{\gamma_0 3}}{\partial p_3}$	2.247139	2.243900	2.246857

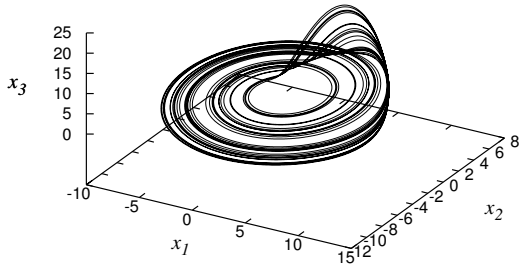


Fig. 2: Chaos attractor of Rössler system (24)

$[7.000000 \ 3.245391 \ 7.073312]^T$ ,  $T = 5.883815$  と得られた。この周期軌道を Fig. 3 に示す。また、このときに得られたヤコビ行列  $D\phi$  は、

$$D\phi = \begin{bmatrix} -0.4955842 & -1.771688 & -0.2164724 \\ -0.04617354 & 0.5178314 & 0.3696712 \\ 3.666982 & 7.742871 & -1.461717 \end{bmatrix}$$

で、その固有値は、 $[-2.439469, -6.902031 \times 10^{-15}, 1.000000]$  であり、不安定なリミットサイクルが求められたことがわかる。

提案法によって求められた不安定なリミットサイクルの周期感度、及び交点の感度を Table 4 に示す。また、結果の妥当性を検証するために、4.2 節と同様に差分法により近似的に求めた感度と比較する。 $p_i, i = 1, 2, 3$  をそれぞれ  $\Delta p_i = 0.01, 0.001$  だけ変化させたときの周期  $\hat{T}$  とポアンカレ断面との交点  $\hat{x}_{\gamma_0}$  を求め、(25) 式と (26) 式の周期感度と交点の感度の近似値を求めた結果を Table 4 に示す。Table 4 より、提案法による計算結果は妥当であると確認できる。

さらに、ポアンカレ断面を  $\Sigma_b: \sigma(\mathbf{x}) = x_2 - 3.0 = 0$  とした場合、 $\Sigma_c: \sigma(\mathbf{x}) = x_3 - 7.0 = 0$  とした場合の感度も求めると、それぞれ Table 5 のように得られた。よって、周期感度がポアンカレ断面によらず同じであることがわかる。

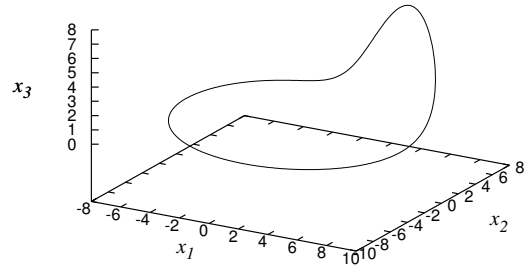


Fig. 3: An unstable limit cycle embedded in chaos attractor of Fig. 2

Table 5: Sensitivities of unstable limit cycle obtained by the proposed method at different Poincaré sections

	$\Sigma_a$	$\Sigma_b$	$\Sigma_c$
$\frac{\partial T}{\partial p_1}$	-1.553529	-1.553529	-1.553528
$\frac{\partial T}{\partial p_2}$	0.5276283	0.5276283	0.5276281
$\frac{\partial T}{\partial p_3}$	0.02702760	0.02702762	0.02702765

## 5 おわりに

リズム現象は、ありとあらゆるシステムにみられる興味深い非線形現象で、その発生メカニズムを解明し、その成果を利用してシステムの解析、設計における種々の問題の解決を図ろうとする研究が盛んになっている。本稿では、非線形自律システムに現れるリズム現象を対象としてその感度解析法について議論し、特に、リズムの周期のパラメータに関する感度を求める方法を提案した。そのために、システムのリミットサイクルの周期に対するパラメータ感度の厳密な表現を導き、それに基づき周期感度を計算するための精度が高くかつ計算効率が良い計算アルゴリズムを導出した。提案した方法は、安定なリミットサイクルの周期感度だけでなく、たとえばカオスアトラクターに埋め込まれた不安定なリミットサイクルの周期感度も求めることのできる方法となっている。

## 参考文献

- 1) D. Edelson, V. M. Thomas: Sensitivity Analysis of Oscillating Reactions. 1. The Period of the Oregonator, *J. Phys. Chem.*, **85**-11, 1555/1558 (1981)
- 2) M. A. Kramer, H. Rabitz, J. M. Calo: Sensitivity Analysis of Oscillatory Systems. *Appl Math Modelling*, **8**, 328/340 (1984)
- 3) A. K. Wilkins, B. Tidor, J. White, P. I. Barton: Sensitivity Analysis for Oscillating Dynamical Systems, *SIAM Journal on Scientific Computing*, **31**-4, 2706/2732 (2009)
- 4) J. Guckenheimer and P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Field*. New York: Springer-Verlag (1983)
- 5) 黒江：ダイナミカルシステム入門，計測と制御，**46**-4, 230/239 (2007)
- 6) Y. Kuroe: Computer-Aided Design Method of Stabilizing Controllers for Chaotic Systems, Proceedings of 2012 IEEE International Symposium on Intelligent Control (ISIC) Part of 2012 IEEE Multi-Conference on Systems and Control, 282/288 (2012)
- 7) A. T. Alligood, T. D. Sauer and J.A. York: *Chaos, An Introduction to Dynamical Systems*, New York, Springer-Verlag (1997)

# 制約ネットワークにおける不良設定問題を解く一手法

鈴木 秀明 (情報通信研究機構)

## A Method to Solve an Ill-posed Problem in Networks Representing Constraints

\*Hideaki Suzuki (NICT)

**Abstract**— Deductive inference and syntax analysis are formulated as an ill-posed problem in Petri-nets, wherein we have to choose an appropriate subnet with consistent variable substitutions. For this problem, the paper revises a token-based algorithm ELISE (ELiminating Inconsistency by SElection) by introducing ‘genome’ for a token, and shows experimentally that the revised algorithm can extract a solution subnet from the redundant Petri-net if the solution subnet is not large. Future research agenda for tackling a problem of extracting larger solution subnets is argued.

**Key Words:** Network, Token, Ill-posed problem

### 1 はじめに

知識推論や言語処理といった問題では、これまでシークエンシャルな処理を基本にアルゴリズムの開発と実装が進められてきた。知識処理言語として名高い Prolog (7, 1, 17) は逐次型言語であり、その処理系は、ホーン節の本体部にある複数のアトムを順番に展開して得られる AND/OR 木を深さ優先で探索する。また、プログラミング言語のコンパイラ LL(1)、LR(1) (6, 8, 13, 14) や自然言語処理のための構文解析アルゴリズムである Earley パーザ (2) は、与えられた文 (記号列) を左から右に順番に読みながら解析木を探索するのを基本とする。これら処理系の逐次性は、しかしよく考えてみると、開発や実装の都合上導入されたものであり、問題そのものは並列的に捉えることが可能である。

最近鈴木らによって、知識推論や言語処理といった問題における要求制約をグラフによって可視化した、知識推移ネットワーク (Knowledge Transitive Network; KTN) (18, 19, 22, 23, 25)、あるいは文法推移ネットワーク (Grammatical Transitive Network; GTN) (24) という表現形式が提案された。これらのネットワークでは、それぞれ知識 (論理プログラム) や文法 / 入力文といった制約条件がネットワーク・トポロジーで表現されており、演繹や解析といった問題は、それらネットワークを展開して得られる半無限 AND/OR 木の中で、部分木の探索と記号列の辻褃合わせとして定式化される。

本論文は、このような制約木における無矛盾な部分木の探索というある種の不良設定問題に注目し、それを並列分散的に解く手法として、ELISE (ELiminating Inconsistency by SElection) (20, 21, 19, 22) と呼ばれるトークン伝搬を基本にした求解アルゴリズムの性能評価を行なう。特に、「辻褃合わせ」と「選り出し」という2つの基準を同時に満たす解を探索するため、トークンに記号列とゲノム (プレース 記号列の対応マップ) を持たせ、トークンを記号の無矛盾性とゲノムサイズの双方で評価・選択していく手法を提案する。それを GTN に適用した実験結果についても述べる。

以下まず、第2節で KTN と GTN の概略を述べた後、第3節で ELISE のアルゴリズムとその改訂手法について述べる。第4節で実験結果を述べ、第5節に結論と今後の課題を与える。

### 2 KTN と GTN

知識推移ネットワーク (Knowledge Transitive Network; KTN) は、最初データフロー型 (Data-flow-based KTN; dKTN) として提案された (18, 19, 22)。このネットワークは、1980年~1990年代に研究された高レベルペトリネット (4, 5, 16, 10, 11, 15, 9, 12, 3) と密接な関係を持っており、変数や関数を含む一階述語論理プログラムのグラフによる直接的表現になっている。dKTN は最近鈴木らによりペトリネット型 (Petri-net-based KTN; pKTN) に改訂され、グラフ規模の大幅な縮小と処理の均一性が達成された (23, 25)。

pKTN の特徴を以下にまとめる。

- ネットワークはトランジションとプレースから成る有向2部グラフである。トランジションとしては、分解/合成 (Split/Combine;  $\in$ ) と論理積 (Logical AND;  $\&$ ) の2種類が用意され、またプレースは述語または変数/定数を表わす。
- 一階述語論理、特にホーン節の集合で表わされる任意の論理プログラムが、所定の規則によって pKTN へと変換できる (Fig. 1)。
- 演繹推論ではまず、pKTN がゴール節を起点として、無向の展開 pKTN (AND/OR グラフ) へ変換される。この時、複数の入力アークを持つプレースは、複数のプレースへとコピーされる (Fig. 2)。
- 演繹解の有無は、あるシンボル代入 (単一化) の下での展開 pKTN の真偽、即ち根を真とする部分グラフの存在の有無と等価であることが証明できる (健全性と完全性)。

一方文法推移ネットワーク (GTN) は、任意の文脈自由文法を表わすペトリネットとして、ごく最近鈴木により提案された (24)。Fig. 3 に、言語  $\{a^m b^n | m, n \geq 0\}$  を生成する文脈自由文法で、書き換え規則

$$\left. \begin{array}{l} S \rightarrow AB \\ A \rightarrow aA \\ A \rightarrow \epsilon \\ B \rightarrow bB \\ B \rightarrow \epsilon \end{array} \right\}. \quad (1)$$



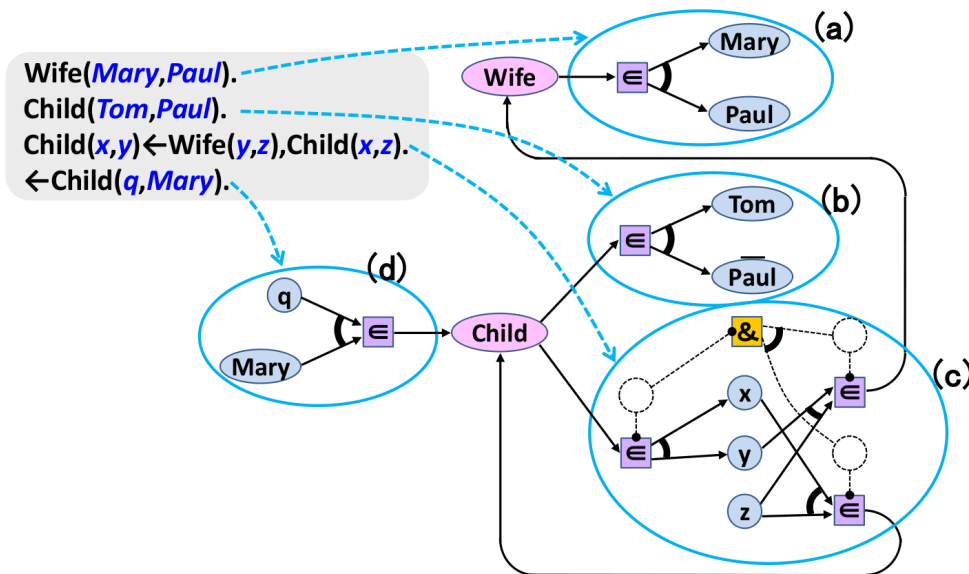


Fig. 1: 述語論理（ホーン論理）プログラムから pKTN への変換の例。図中、四角がトランジションを、円や楕円がプレースを表わしている。それらを繋ぐ有向の線はアークと呼ばれる。

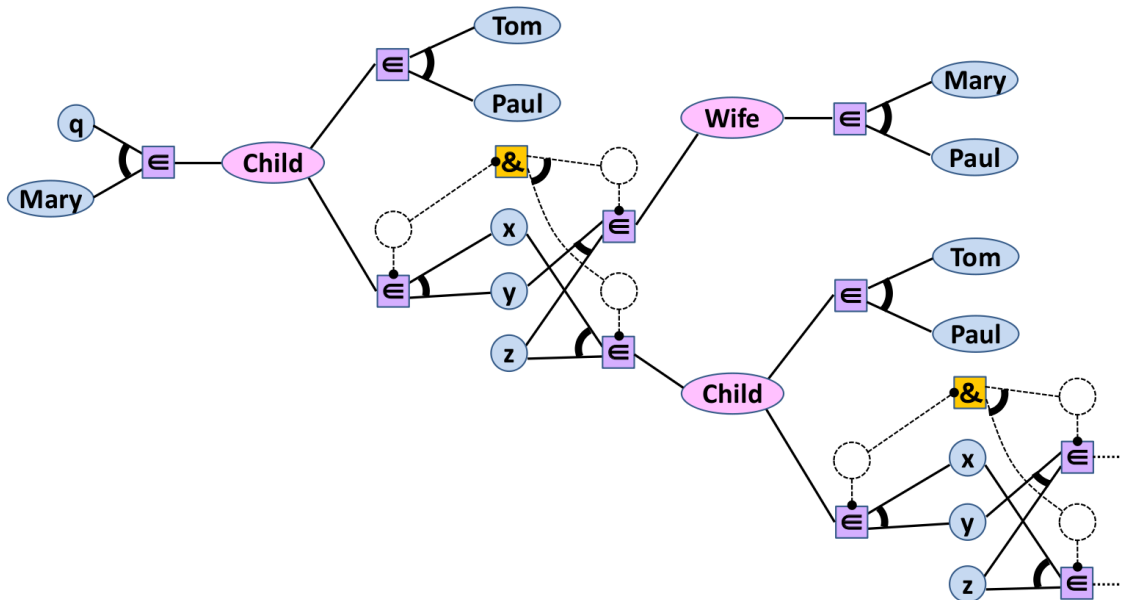


Fig. 2: Fig. 1 のループを 1 回だけ解いて得られる展開 pKTN (AND/OR グラフ)。入力アークを 2 本受け取る *Child* プレースが、2 つにコピーされていることに注意。

を持つものを例に取り、GTN を図示した。ここに  $S$  は初期記号、 $A, B$  は非終端記号、 $a, b$  は終端記号、 $\epsilon$  は空記号である。

GTN の一般的な特徴を以下にまとめる。

- ネットワークはトランジションとプレースから成る有向 2 部グラフである。トランジションとしては、接続 (Concatenate;  $\epsilon$ ) と等価 (Equal;  $=$ ) の 2 種類が用意される。一方プレースは、非終端記号 (変数) または終端記号 (定数) を表わす。
- 任意の文脈自由文法が、GTN へと変換できる (Fig. 3(a))。

- 構文解析ではまず、GTN が初期記号プレース  $S$  を起点として、無向の展開 GTN (AND/OR グラフ) へと変換される。GTN 中、複数の入力アークを持つ変数プレースは、展開で複数のプレースへとコピーされる。また入力記号列は、制約部分グラフとして初期記号プレース  $S$  に付与される (Fig. 3(b))。

- 構文解析は、 $S$  を含む展開 GTN の部分木で、プレースが持つ記号列間が無矛盾なものを探す処理として定式化される。

このように pKTN、GTN の双方で、演繹推論 / 構

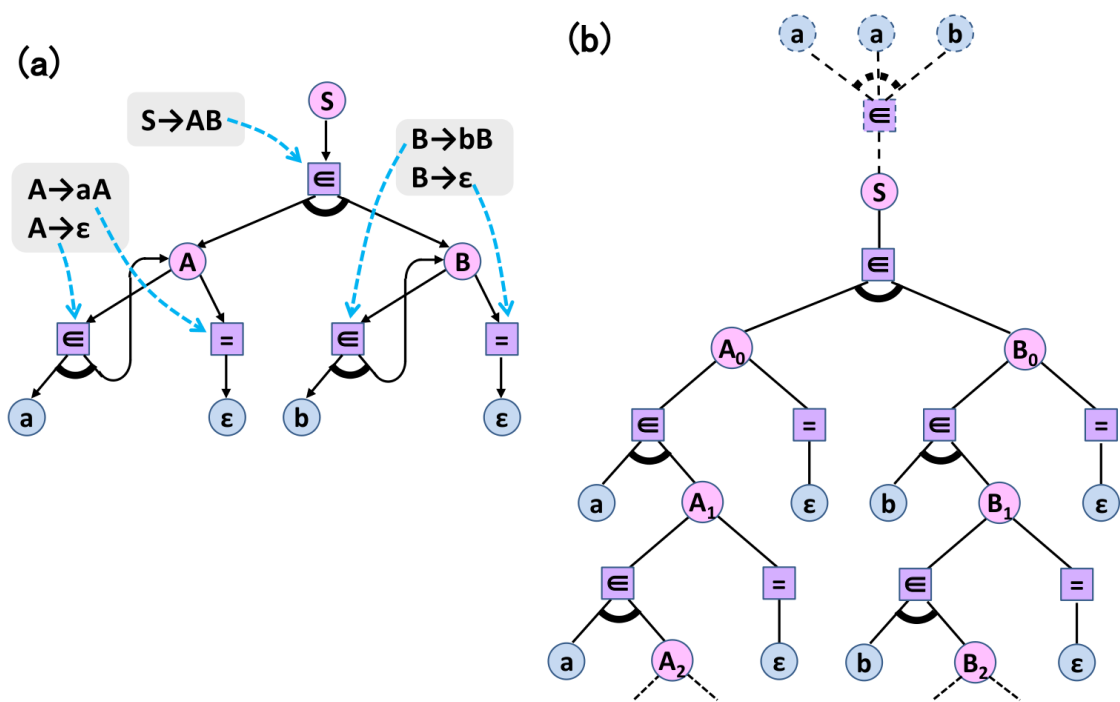


Fig. 3: (a)GTN と、(b) それを展開して得られる展開 GTN (深さ 2 まで)。ここに、 $A, B$  は非終端記号、 $a, b$  は終端記号、 $\epsilon$  は空記号。図中、四角がトランジションを、円がプレースを表わし、それらが (a) では有向アークによって繋がれている。トランジション  $\epsilon$  の複数の出力アークは論理 AND の関係を持ち、順番が問題となるが、プレースから出力される複数のアークは論理 OR の関係を持ち、順番は問題とならない。展開に伴い、例えば (a) の非終端記号プレース  $A$  は、(b) では添字で区別された複数のプレース  $A_0, A_1, \dots$  にコピーされる。(b) の  $S$  の上部にある点線のグラフは、入力記号列として  $aab$  が入る場合に付与される制約部分グラフである。

文解析といった目標問題は、無限に続く展開 AND/OR 木の中で無矛盾な部分木を見つけるという問題に定式化される。次節では、このように定式化された問題を、ペトリネット特有のトークンの並列分散処理によって解く一つの方法について議論する。

### 3 ELISE

ELISE (ELiminating Inconsistency by SElection; エリーゼ) は、データフロー・ネットワークやペトリネットといった分散ネットワークの中を流れるトークンを進化によって辻褃合わせし、埋め込まれた制約条件を満足する解を漸近的に求める方法である。

周知のように、非同期処理のモデルとして見たペトリネットでは、ネットワーク中をトークンが流れ、そのトークンが運ぶ「値」が、各トランジションにおける発火で改変されることにより計算処理が進められる<sup>12)</sup>。ELISE ではこの「値」( $x$  と表記) が表わす対象を拡張し、数値、シンボル、またはシンボルリスト (記号列) を表わすこととする。またそれと同時に、各トークンに「信頼度」と呼ばれる実数値  $r$  を付与し、各プレースに設けられたトークン・プールの中で、 $r$  を適応度としてトークン進化を行なわせる。このようなトークンの生成 (改変)・進化を繰り返すことにより、ネットワーク内のトークン集団が、ネットワークに埋め込まれた制約条件に合致するものへと収束することが期待される。

これまで ELISE は数値連立方程式<sup>20, 21)</sup> やシンボル連立方程式<sup>19, 22)</sup> を表わすデータフロー・ネットワークに適用され、近似解法としての有効性が示されてき

た。しかしながらこれらの実験で用いられた制約ネットワークには『冗長性』は含まれておらず、トークンは与えられた全ネットワークを制約の対象と仮定して、無矛盾性を追求しさえすればよかった。(数値連立方程式の場合は、いわゆる「不能」の問題も扱われたが、条件の選び出しは対象とせず、近似解を得ることが目標とされた。)しかし、前節で与えた pKTN や GTN における問題を ELISE で解く時、先の仮定は成り立たない。トークンは解を与える部分ネットワークを全ネットワークから選び出しながら、その部分ネットワーク内で値の辻褃合わせをしなければならない。もしこの抽出した部分ネットワークが大き過ぎたならば、値を無矛盾にすることはできないし、またもしこの選ばれた部分ネットワークが小さ過ぎたならば、トークンは trivial な解へと収束してしまうだろう。

以下本論文では、このような「無矛盾性」と「適切な条件の抽出」という 2 つの要求を同時に求める不良設定問題に適用するために、ELISE の仕様を拡張し、トークンに、

- シンボル (記号列)  $s$ 、
- $m_c$  (number of consistent meetings)、
- $m_a$  (number of all the meetings)、
- cpm (consistent pool-symbol map)、
- 適応度  $r$

の 5 つの変数を持たせたモデルを取り扱う。ここに、 $m_c$  と  $m_a$  はシンボル無矛盾性のための実数変数であり、cpm は部分ネットワークの大きさ評価のためのマップ (集合) である。cpm (以後これをゲノムと呼ぶ) は具体的には、相互無矛盾な (プレース id シンボル) 対

Table 1: 改訂版 ELISE の処理の流れ

---

[初期化] 各変数プレースのプールを  $N$  (プールサイズ) 個の初期トークンで満たす。  
 (トークンの  $s$  値はランダムに選び、それによる (プレース id  $s$ ) 対応を  $cpm$  に代入する。)  
 ( $m_c$  と  $m_a$  は 0 にリセットされる。)

次のタイムステップ処理を繰り返す。

[タイムステップ処理]

各トランジションは、次の処理をする。これを全トランジションに対して実行する。

トランジションは、まず全周辺プレースからトークンを 1 個ずつ pop する。  
 (変数プレースでは、プールから  $r$  に比例してトークンを選ぶ。pop したトークンはプールから消さない。)  
 (定数プレースからは、プレースの定数値を  $s$  に持つトークンが出力される。)

pop トークンから出力を 1 つ (残りを入力に) 選び、次の発火処理を行なう。これを全トークンに対し実行する。

[発火処理]

入力トークン間で  $s$  と  $cpm$  の無矛盾性をチェックする。  
 もし矛盾があれば (入力トークンと無矛盾な出力トークンが作れないなら) 発火はしない。  
 もし矛盾がなければ、

次の要領で訂正トークンを作成する：

訂正トークンの  $s$  には、入力シンボルから逆算により求めた記号列を代入。  
 訂正トークンの  $m_c, m_a$  には、全入力トークンの平均値を継承。  
 訂正トークンの  $cpm$  には、全入力トークンの  $cpm$  をマージしたものに (出力プレース id 訂正シンボル) 対応を追加したものを継承。  
 訂正トークンの  $s$  と出力トークン (訂正前トークン) の  $s$  との間の無矛盾性をチェックする。  
 もし矛盾があれば、  
 訂正トークンを確率 0.95 で出力プレース・プールに push する。  
 もし矛盾がなければ、  
 訂正トークンを確率 1 で出力プレース・プールに push する。

[無矛盾性チェック] プールにトークンが push されたならば、次の処理を行なう。  
 新規トークンがプールの中で全既存トークンとペアリング。各ペアごとに次の処理をする。  
 両トークンの  $m_a$  を +1 する。  
 $s$  が一致していたならば、両トークンの  $m_c$  を +1 する。

[プール進化] プールサイズ  $\geq \xi * N$  となったならば、次の処理を行なう。  
 [選択] プールサイズ =  $N$  となるように、 $r^2$  に比例してトークンを取り直す。  
 [突然変異] 確率  $u$  で、トークン・シンボルをランダムな文字列に変異させる。

全プール全トークンの  $m_c$  を 0.95 倍に減衰する。

[解到達判定] 根の 3 つの変数プレースのプールで (正解トークン頻度)  $> 0.5$  となったならば、実行を終える。

---

応の集合であり、 $|cpm|$  (=ゲノム長) が大きいほど、トークンはより大きな部分グラフのシンボルを無矛盾にできることを表わす。改訂版 ELISE では、このような  $cpm$  を発火におけるマージによりトークン変数として構成していき、それを加味してトークン選択を行なわせる。

改訂版 ELISE の処理の流れを Table 1 に示す。この中の pop や選択の際に、トークン適応度  $r$  は、それが持つ変数を用いて

$$r = \exp(\kappa_c \cdot m_c / m_a + \kappa_s \cdot |cpm|) \quad (2)$$

によって計算される。ここに  $\kappa_c, \kappa_s$  は実験パラメータとなる。式 (2) の  $\exp$  内の第 1 項はプール内で他トークンとシンボル無矛盾であるほど高まる量であり、ローカルな基準を反映した項となっている。一方、第 2 項はゲノム長に比例して増大する量であり、解を構成する部分木のグローバルな大きさを反映した項となっている。

なお Table 1 中、訂正トークンを生成するために用いられる『逆算』は、ELISE 特有の処理であり、これ

によってトランジションは任意の向きに発火し、訂正シンボルを生成できる。例えば Fig. 3(b) で  $S$  の  $aab$  と  $A_0$  の  $a$  が  $S$  の真下の  $\in$  トランジションで発火した場合、新たに訂正トークン  $ab$  が生成されて  $B_0$  にストアされる。

#### 4 実験結果

前節の ELISE を適用して、GTN 上で構文解析を行なわせる実験を行なう。対象として式 (1) で表わされる文脈自由文法から導いた GTN (Fig. 3(a)) を例に取り、これを深さ 3 から 10 までに展開したものに、入力文字列  $aab, \dots, aaabbb$  を加える。実装は Java で行ない、それをデスクトップ PC (プロセッサ: CoreTM 2 Duo 1.86GHz, OS: Linux) 上で走らせた。ELISE の実験パラメータは、予備の実験によって  $\kappa_c = 4.0$ ,  $\kappa_s = 0.04$ ,  $N = 5$ ,  $\xi = 5$ ,  $u = 0.003$  のように決定した。各条件ごとに乱数の種を変えながら 10 回ずつ run を行ない、解に到達するまでのタイムステップ数の平均を計測した。

Table 2 に、入力文字列を固定し、展開 GTN の深さ依存性について収束時間を計測した結果を示す。この

Table 2: 実験結果 – 冗長な枝の量への依存性

展開 GTN		入力文字列	平均収束時間
深さ	トランジション総数		
3	14	aab	179.3
4	18	aab	122.3
6	26	aab	231.5
8	34	aab	210.2
10	42	aab	255.7

Table 3: 実験結果 – 入力文字列長への依存性

展開 GTN		入力文字列	平均収束時間
深さ	トランジション総数		
10	42	aab	255.7
10	42	aabb	1112.3
10	42	aaabb	2017.1
10	42	aaabbb	11528.8

表によると、解グラフ（正解の部分木）の大きさが変わらなければ、たとえ展開 GTN のネットワーク規模が大きくなり、冗長な枝が増しても、ELISE の収束時間はほとんど変わらないことが分かる。これは改訂版 ELISE が、全ペトリネット中から正解部分グラフを効果的に抽出できることを示すものである。

一方 Table 3 には、展開 GTN 全体をやや大きめに固定し、入力文字列長を変えた場合の収束時間の結果を示す。この表によると ELISE は、入力文字列が長くなり、正解グラフの規模が大きくなると、収束時間を急激に増大させている。これは、言語処理のための構文解析ツールに通常求められる、文字列長の 1 乗～2 乗程度の計算時間<sup>6, 8, 2, 13, 14</sup>には程遠い結果であり、今後の改良により改善されることが求められる。最終節ではその可能性について議論する。

## 5 結論と考察

一階述語論理知識や言語処理のための文法制約をペトリネット形式で表現する pKTN、GTN の枠組みを示し、その上で演繹推論 / 構文解析といった問題が、部分ネットワークの選び出しと、その部分ネットワーク上での記号の辻褃合わせを同時に行なう『不良設定問題』に定式化できることを述べた。これを解くためのアルゴリズムとして、トークン伝搬に基づく並列分散的なアルゴリズム ELISE を改訂し、シンボル無矛盾性というローカルな基準と、無矛盾グラフの大きさというグローバルな基準の両方を考慮してトークンの選択・進化を行なわせる手法を提案した。この手法を文脈自由文法の構文解析問題に適用した実験を行なった結果、改訂版 ELISE の収束時間が、ペトリネット中の冗長な枝の量には依存せずほぼ一定に抑えられる一方で、正解部分グラフのサイズに依存して著しく増加することが分かった。

改訂版 ELISE で不良設定問題を解く場合に、正解に到達するまでの時間を増大させる主な要因は、ローカル解への収束である。今、ペトリネットの中の各プールが、正解とは異なるがそこそこ大きな部分グラフにおいて無矛盾なシンボルを持つローカル解のトークン

によって占められている場合を考える。この状態でたとえ正解の記号列を持つトークンが 1 個現われたとしても、そのトークンのゲノム長は最初小さく、伝搬によって仲間を増やし大きなゲノム長になるまでは、進化によってプールから駆逐されてしまう公算が高いと考えられる。この問題を解決し、正解がネットワークの中で速やかに広まるようにすることが今後の課題である。

## 参考文献

- 1) Bratko, I.: Prolog Programming for Artificial Intelligence (Third Edition). Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, USA (2001) 邦訳: Bratko, I.(著), 安部憲広(訳) Prolog への入門 (Prolog と AI) . 近代科学社 (1990)
- 2) Earley, J.: An efficient context-free parsing algorithm. Communications of the Association for Computing Machinery **13**(2) (1970) 94-102
- 3) Jeffrey, J., Lobo, J., Murata, T.: A high-level Petri net for goal-directed semantics of Horn clause logic. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering **8**(2) (1996) 241-259 DOI: 10.1109/69.494164
- 4) Jensen, K.: Coloured Petri Nets and the Invariant Method. Theoretical Computer Science **14** (1981) 317-336 North-Holland Publishing Company.
- 5) Jensen, K.: How to find invariants for coloured Petri nets. Lecture Notes in Computer Science **118**, Springer-Verlag (1981) 327-338
- 6) Knuth, D.E.: On the translation of languages from left to right. Information and Control **8** (1965) 607-639
- 7) Kowalski, R.: Logic for Problem Solving. Elsevier Science Ltd. Amsterdam, The Netherlands (1979) 邦訳: コワルスキー著、山田他訳: 論理による問題の解法 Prolog 入門 . 培風館 (1987)
- 8) Lewis, P.M., Stearns, R.E.: Syntax-Directed Transduction. Journal of the ACM **15**(3) (1968) 465-488
- 9) Lin, C., Chaudhury, A., Whinston, A.B., Marinescu, D.C.: Logical Inference of Horn Clauses in Petri Net Models. IEEE Transactions on Knowledge and Data Engineering **5**(3) (1993) 416-425
- 10) Murata, T., Zhang, D.: A predicate-transition net model for parallel interpretation of logic programs. IEEE Transactions on Software Engineering **14**(4) (1988) 481-497
- 11) Murata, T.: Petri nets: Properties, analysis and applications. Proceedings of the IEEE **77**(4) (1989) 541-580 doi: 10.1109/5.24143
- 12) 村田忠夫: ペトリネットの解析と応用 . 近代科学社 (1992)
- 13) 中田 育男: コンパイラの構成と最適化 . 朝倉書店 (1999)
- 14) 大川 知, 鈴木 大郎: コンパイラ言語処理系の基礎から yacc/lex まで . 近代科学社 (2008)
- 15) Peterka, G., Murata, T.: Proof procedure and answer extraction in Petri net model of logic programs. IEEE Transactions on Software Engineering **15**(2) (1989) 209-217 DOI: 10.1109/32.21746
- 16) Reisig, W.: Petri nets: an introduction. Springer-Verlag, New York, Inc. New York, NY, USA (1985)
- 17) Sterling, L., Shapiro, E.: The Art of Prolog, Advanced Programming Techniques. MIT Press, Cambridge (1986) 邦訳: Prolog の技芸 . 共立出版 (1988)
- 18) 鈴木 秀明, 吉田 幹, 澤井 秀文: 演繹推論を実現するデータフローネットワークの提案 . 人工知能学会研究会資料 人工知能基本問題研究会 (第 83 回) SIG-FPAI-B102 (2011) 1-7

- 19) Suzuki, H., Yoshida, M., Sawai, H.: A data-flow network that represents first-order logic for inference. In: Kuo, Y.H., Tseng, V.S.M., Kao, H.Y., Hong, T.P., Horng, M.F. (eds.): The 2012 Conference on Technologies and Applications of Artificial Intelligence TAAI, Proceedings (2012) 211-218 DOI: 10.1109/TAAI.2012.44
- 20) 鈴木 秀明: 逆算と進化により連立方程式を解くデータフロー・ネットワークの提案. 第 57 回システム制御情報学会研究発表講演会講演論文集 (SCI'13) (2013) 317-4
- 21) Suzuki, H., Iwasa, Y.: A network-based evolutionary method to solve inconsistent simultaneous equations approximately. AIP Conf. Proc. **1558** (2013) 2486 (Proceedings of International Conference of Numerical Analysis and Applied Mathematics (ICNAAM).) <http://dx.doi.org/10.1063/1.4826045>
- 22) Suzuki, H., Yoshida, M., Sawai, H.: A network representation of first-order logic that uses token evolution for inference. To be published in: Journal of Information Science and Engineering (JISE) **30**(3) (2014)
- 23) 鈴木秀明, 吉田 幹: 述語を変数ノードに持つペトリネット型 KTN を用いた論理表現と演繹. 計測自動制御学会 (SICE) 第 41 回知能システムシンポジウム資料 (2014) B22-3
- 24) 鈴木秀明: 入力語にあいまい性を許す構文解析器の提案. 言語処理学会第 20 回年次大会発表論文集 (2014) 428-431
- 25) Suzuki, H., Yoshida, M.: Direct graphical representation of first-order logic for inference. To be published in: Lambert, M.J. (ed.): Logic Programming: Theory, Practices and Challenges. Nova Science Publishers, Inc. (2014) ISBN: 978-1-63117-853-5

# 実行可能化演算を伴う進化計算アルゴリズムを用いた 連想記憶モデルのパラメータ最適化

○増田 和明 (神奈川大学)

## Parameter Optimization for Autoassociative Memory Models by Using Evolutionary Algorithms with Feasibilization Operation

\*K. Masuda (Kanagawa University)

**Abstract**— We propose new formulation of parameter optimization problems for autoassociative memory models and their solution with the aid of evolutionary computation. In our conventional work, such models had been extended by parametrizing particular elements in stages and the corresponding parameter optimization problems were finally formulated as mixed-integer nonlinear programming (MILP) problems. However, they are hard to solve by using generic solvers due to co-existence of many continuous and discrete decision variables. In this paper, we re-formulate them as continuous global optimization problems to be directly solved by numerical optimization methods like evolutionary algorithms. To handle some complicated constraints, we also propose to use the evolutionary algorithms with feasibilization operation developed in our other work. Some numerical examples will be presented to examine the validity of formulation and the effectiveness of numerical solution methods.

**Key Words:** autoassociative memories, artificial neural networks, nonlinear optimization, evolutionary computation, constraint handling

### 1 はじめに

連想記憶は、予めいくらかの情報を格納しておくことができ、何らかの情報が提示されたときにそれと最も関連の高い情報を取り出すことができる記憶機構である。生物学、統計学、情報学の文脈で1970年代に提案された自己相関連想記憶モデル [1–3] は、0-1 バイナリパターンとして表現される情報を人工的なリカレント型ニューラルネットワーク (N.N.) に埋め込み、何らかの入力信号があると N.N. に埋め込まれている情報を出力することができる [4]。ただし、連想記憶の N.N. に埋め込むべきパターンが多くなると、このモデルがそれらを正しく埋め込めないことが指摘されている [4]。

著者らは、最適化の文脈で連想記憶モデルを理解することを試み、上記の失敗が発生する原因を探ってきた [5–11]。この文脈では、N.N. にパターンを埋め込む「記録」は2次式で与えられるエネルギー関数を設計すること、入力された信号に対応して N.N. 中のパターンを1個出力する「想起」は0-1 上下制限条件の下でエネルギー関数の局所的な最小点を発見することと理解される。また、非線形最適化理論から、あるパターンが N.N. に正しく記録されるための必要条件が導き出される。文献 [1–3] の自己相関連想記憶モデルは、N.N. のエネルギー関数の最大点を指定しておき、埋め込むべきパターンの自己相関行列を用いてその係数 (N.N. の結合係数やしきい値) を与えるが、このモデルでは上述の最適性条件が全く考慮されておらず、記録時に誤りが発生することが避けられない。一方、文献 [5–7] の実験的考察から、自己相関連想記憶モデルの記録能力は N.N. に埋め込むべきパターンの分布に依存することを見出した。

以上の事実を踏まえて、著者らは文献 [8] において、自己相関連想記憶モデルを基礎として N.N. に埋め込むべきパターンを重み付けることによってそれらの分布を変える「重み付き記録モデル」を提案した。このとき、全パターンを正確に記録するための必要条件を考

慮し、線形計画 (Linear Programming, LP) 問題として定式化した最適化問題を解いて各パターンの重みを決定した。ただし、重みをどのように定めても全パターンを正確に記録することができず、文献 [8] の LP 問題が実行可能解を持たない場合があるため、文献 [9] ではこの LP 問題に含まれる制約条件を緩和し、一部が正しく記録されなくても構わないができるだけ多くのパターンを正しく記録する手法として、混合整数線形計画 (Mixed-Integer Linear Programming, MILP) 問題に拡張した重み決定問題を提案した。さらに、文献 [10] では N.N. のエネルギー関数が持つ最大点の位置 (ピーク位置) も変化させる「重み付き・ピーク移動型記録モデル」を提案し、記録能力の向上を図った。重みとピーク位置を同時に決定する問題は混合整数非線形計画 (Mixed-Integer Non-Linear Programming, MINLP) 問題として定式化され、直接的に解くことは容易でないため、重みとピーク位置を交互に固定し、前者だけを決定する問題を MILP ソルバーを用いて解き、後者だけを決定する問題を確率的な山登り法によって解く操作を交互に実行する反復解法も提案した。文献 [11] では、MINLP 問題の解法を工夫することによって記録能力が向上する数値例を示した。しかしながら、従来の研究を振り返ると、

- (a) 記録モデルの拡張に関する問題：文献 [8] を出発点とする記録モデルの拡張では、新たなパラメータを導入することでモデルの自由度を高め、それによって記録能力の向上を期待した。しかし、既存のモデルの枠組みに縛られて一部の要素だけパラメータ化することは抜本的な解決と言えないし、上記の期待を裏付ける合理的な説明を与える段階に至っていない。
- (b) パラメータ決定問題の定式化および解法に関する問題：文献 [8] で LP 問題として定式化することに成功したため、この枠組みを崩さない範囲で MILP 問題、MINLP 問題へと拡張を続けてきた。しかし、

既に問題が複雑化しており標準的なソルバーによって容易に解かれる範囲を超えており、かつ技巧的な定式化も問題を複雑化させる一因であるため、自然な形で得られるメリットが薄れている。定式化の見直しによって問題を単純化し、別の有望な手法を適用して解を求めることも考えるべきである。

といった問題を挙げることもできる。

本論文では、まず (b) に関して「重み付き・ピーク移動型記録モデル」のパラメータ決定問題を、単純な制約条件だけを伴う大域的最適化問題として定式化することを試みる。そして、粒子群最適化 (particle swarm optimization, PSO) [12,13] や差分進化 (differential evolution, DE) [14,15] に代表される進化計算アルゴリズムを用いて、直接的に解を求めることを考える。さらに、(a) に関して、記録モデルに含まれる要素を全てパラメータ化した問題を考える。この問題を解くことは、ある意味で最も記録能力の高いモデルを発見する試みとも解釈される。このとき、特に実行列の半正定性に関する制約条件を扱うために、最近著者が提案した「実行可能化演算を伴う」進化計算アルゴリズムを用いた解法 [16] を利用する。

本論文の構成は以下の通りである。2章で、自己関連連想記憶の古典的な記録モデル、ならびに「重み付き・ピーク移動型記録モデル」を紹介する。3章では、「重み付き・ピーク移動型記録モデル」に対するパラメータ決定問題の新たな定式化を与え、進化計算アルゴリズムを適用した数値例を示す。さらなる試みとして、4章では、記録モデルに含まれる全ての要素をある意味で最適に決定する問題を定式化し、実行可能化演算を伴う進化計算アルゴリズムを適用した数値例を示す。最後に、5章で結論と今後の展望を述べる。

## 2 自己関連連想記憶の記録モデル

連想記憶の数理モデルは様々な文脈で理解されるが、特に非線形最適化理論の文脈において以下の説明を与えることができる。

- 1) 連想記憶に与えられたパターンを埋めこむ「記録」は、それらがエネルギー関数の局所的な最小点になるように関数の係数パラメータを決定することである。
- 2) 連想記憶に埋め込まれたパターンに類似する情報が提示されたとき、それに対応するパターンを出力する「想起」は、与えられた情報を初期点と見なしてエネルギー関数の局所的な最小点を発見することである。

自己関連連想記憶の枠組みで、1個の連想記憶に複数のパターンを正確に記録することが難しい。しかも、記録の失敗が想起の失敗につながるため、本論文では1)の記録を実現するための方法に注目する。逆に、連想記憶にパターンが埋め込まれているとき、2)の想起は例えばエネルギー関数の勾配を用いる最急降下モデルなどを用いて容易に実現される。

以下では、 $N$ ビット ( $N > 0$ ) の0-1バイナリ列で与えられる  $Q$  個 ( $Q > 0$ ) のパターンを記録することを考える。第  $q$  パターンを  $\mathbf{p}_q = [p_{q1}, \dots, p_{qN}]^T$ ,  $q = 1, \dots, Q$  と表し、その第  $n$  ビットを  $p_{qn} \in \{0, 1\}$ ,  $n = 1, \dots, N$  と表す。なお、便宜上、パターンの番号集合を  $\mathcal{Q} = \{1, \dots, Q\}$  で与えておく。

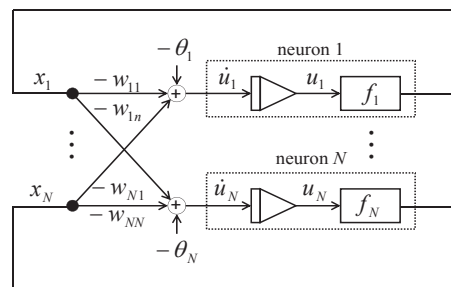


Fig. 1: N.N. representation of an autoassociative memory

連想記憶にパターン  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Q$  を記録することは、2次式で与えられるエネルギー関数  $E: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  に対する最小化問題

$$\min_{\mathbf{x}} E(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2} \mathbf{x}^T W \mathbf{x} + \boldsymbol{\theta}^T \mathbf{x} \quad (1a)$$

$$\text{subj. to } 0 \leq x_n \leq 1, \quad n = 1, \dots, N \quad (1b)$$

が  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Q$  を局所的最適解をもつように、その係数  $W = \{w_{ij}\} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  および  $\boldsymbol{\theta} = [\theta_1, \dots, \theta_N]^T \in \mathbb{R}^N$  を適切に定めることである。ここで、 $W$  は正定値行列もしくは半正定値行列とする。 $\mathbf{x} = [x_1, \dots, x_N]^T \in [0, 1]^N \subset \mathbb{R}^N$  は問題の決定変数であり、連想記憶が取り扱う情報を表す。変数  $\mathbf{x}$  の成分が区間  $(0, 1)$  内の実数値をとれば、バイナリ列にノイズが加わった情報と見なすことができる。0を黒、1を白に対応づければ、 $\mathbf{x}$  をグレースケール画像の輝度値を並べた  $N$  次元ベクトルとも見なすこともできる。なお、(1) 式の問題を解くための最急降下モデルを考えれば、エネルギー関数  $E$  の係数  $W$  と  $\boldsymbol{\theta}$  はそれぞれ Fig. 1 に示すリカレント型 N.N. の結合係数としきい値に対応づけられる。

### 2.1 「標準的な」記録モデル

(1a) 式のエネルギー関数  $E$  における係数  $W$ ,  $\boldsymbol{\theta}$  を与える方法として、1970年代に相次いで提案された自己関連連想記憶 [1-3] では次式の記録モデルが用いられる。

$$W = \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right)^T \quad (2a)$$

$$\boldsymbol{\theta} = W \left( \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) \quad (2b)$$

ただし、全成分の値が1に等しいベクトルを  $\mathbf{1} = [1, \dots, 1]^T \in \mathbb{R}^N$  で表す。(2) 式のモデルではパターン  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Q$  の平均が  $(1/2) \cdot \mathbf{1}$  に等しいと仮定し、 $W$  にそれらの自己相関行列を用い、 $\boldsymbol{\theta}$  には  $W$  に  $(1/2) \cdot \mathbf{1}$  を乗じたベクトルを用いる。このとき、(1a) 式のエネルギー関数は

$$E(\mathbf{x}) = \frac{1}{Q} \sum_{q=1}^Q \left[ -\frac{1}{2} \left\{ \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right)^T \left( \mathbf{x} - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) \right\}^2 + \frac{1}{8} \left\{ \mathbf{1}^T \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) \right\}^2 \right] \quad (3)$$

となり、 $(1/2) \cdot \mathbf{1}$  がその最大点であることがわかる。

(2) 式を用いると連想記憶に多くのパターンを記録することができる。しかし、パターン数  $Q$  やビット長  $N$

が増えると一部のパターンが正しく埋め込まれないことが指摘されている [4]. さらに, 文献 [5] で, エネルギー関数が対称性を持つためにパターン  $\mathbf{p}_q$  を埋め込むとその全ビットを反転 (0 と 1 を反転) したパターン  $\mathbf{1} - \mathbf{p}_q$  が同時に埋め込まれるだけでなく, 本来埋め込むべきパターンともその全ビットを反転したパターンとも異なる不要なパターンが埋め込まれることも指摘されている.

## 2.2 重み付き・最大点移動型記録モデル

著者らは, 2.1 節で説明した記録モデルの問題点を解消するために, 文献 [8] で埋め込むべきパターンの重要度を変化させる「重み付き記録モデル」を提案し, 文献 [10] ではエネルギー関数 (1a) 式の最大点も変化させる「重み付き・ピーク移動型記録モデル」を提案した.

以下に, 本論文で用いる「重み付き・ピーク移動型記録モデル」と, パラメータである重みとピーク位置の決定方法について述べる. パターン  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Q$  に対し, 正規化等式・非負条件を満たす重みベクトル  $\boldsymbol{\xi} = [\xi_1, \dots, \xi_Q]^T$  を導入する. さらに, エネルギー関数の最大点を調整するパラメータ  $\mathbf{x}_{\max} \in [0, 1]^N$  を導入して, (2) 式を以下のように変更することを考える.

$$W = c \cdot \sum_{q=1}^Q \xi_q \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right)^T \quad (4a)$$

$$\boldsymbol{\theta} = W \mathbf{x}_{\max} \quad (4b)$$

ただし,  $c > 0$  は正定数とし, 重みベクトル  $\boldsymbol{\xi}$  の成分は

$$\forall q \in \mathcal{Q} \quad \xi_q \geq 0, \quad \sum_{q'=1}^Q \xi_{q'} = 1 \quad (5)$$

を満たすとす. (4) 式を用いた場合のエネルギー関数は

$$E(\mathbf{x}) = c \cdot \sum_{q=1}^Q \xi_q \left[ -\frac{1}{2} \left\{ \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right)^T (\mathbf{x} - \mathbf{x}_{\max}) \right\}^2 + \frac{1}{2} \left\{ \mathbf{x}_{\max}^T \left( \mathbf{p}_q - \frac{1}{2} \cdot \mathbf{1} \right) \right\}^2 \right] \quad (6)$$

となり, 確かに  $\mathbf{x}_{\max}$  が最大点となる.

ここで, 未知のパラメータ  $\boldsymbol{\xi}$  および  $\mathbf{x}_{\max}$  を決定するために, まずパターン  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Q$  が (1) 式で与えられる 0-1 上下制限約付き最小化問題の局所的最適解になるための必要条件, つまり Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 条件を思い浮かべる. 0-1 上下制限約条件 (1b) 式が不等式制約条件  $x_n(x_n - 1) \leq 0$ ,  $n = 1, \dots, N$  と書き換えられることに注目すると, パターン  $\mathbf{p}_q$  がこの問題の局所的最適解であるならば, 以下の条件を満たすベクトル  $\boldsymbol{\mu}_q^* = [\mu_{q1}^*, \dots, \mu_{qN}^*]^T \in \mathbb{R}^N$  が存在する必要がある.

$$-W \mathbf{p}_q + \boldsymbol{\theta} + \begin{bmatrix} 2p_{q1} - 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 2p_{qN} - 1 \end{bmatrix} \boldsymbol{\mu}_q^* = \mathbf{0} \quad (7a)$$

$$(p_{q1}(p_{q1} - 1), \dots, p_{qN}(p_{qN} - 1))^T \leq \mathbf{0} \quad (7b)$$

$$\boldsymbol{\mu}_q^* \geq \mathbf{0}, \quad \boldsymbol{\mu}_q^{*T} (p_{q1}(p_{q1} - 1), \dots, p_{qN}(p_{qN} - 1))^T = 0 \quad (7c)$$

ただし,  $p_{qn} \in \{0, 1\}$ ,  $q \in \mathcal{Q}$ ,  $n = 1, \dots, N$  であるから (7b) 式および (7c) 第 2 式は自動的に成立するので, 結局 (7a) 式を満たす  $\boldsymbol{\mu}_q^* \geq \mathbf{0}$  が存在すればよい. さらに,

$$2p_{qn} - 1 = \begin{cases} -1 < 0, & \text{if } p_{qn} = 0 \\ 1 > 0, & \text{if } p_{qn} = 1 \end{cases} \quad q \in \mathcal{Q}, \quad n = 1, \dots, N \quad (8)$$

が成り立ち,  $(2p_{qn} - 1)^2 = 1$  であることに注意すれば, (7) 式全体を

$$\boldsymbol{\mu}_q^* = \begin{bmatrix} 2p_{q1} - 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 2p_{qN} - 1 \end{bmatrix} (W \mathbf{p}_q - \boldsymbol{\theta}) \geq \mathbf{0} \quad (9)$$

と書き換えることができる.

以上のことから, 「重み付き・ピーク移動型記録モデル」のパラメータには (5) 式および (9) 式 (すなわち,  $\forall q \in \mathcal{Q} \quad \boldsymbol{\mu}_q^* \geq \mathbf{0}$ ) を全て満足するような  $\boldsymbol{\xi}$  および  $\mathbf{x}_{\max}$  を用いればよいが, これだけではパラメータを一意に決定することができない. しかも, 文献 [9] などで, 上記の条件を全て満足するパラメータが存在しない可能性が指摘されている. そこで, 文献 [9-11] では「一部のパターンが正しく記録されないことを許容して, 正確に記録されるパターンの個数を最大化する」といった目的を設定し, MILP 問題や MINLP 問題としてパラメータ決定問題を定式化した.

本論文でも上記の目的を踏襲するが, 1 章で述べた問題 (a), (b) の解決を目指して, パラメータ決定問題の定式化を改め, その解法も再考する. 詳細は次章以降で説明する.

## 3 重み付き・ピーク移動型記録モデルに対するパラメータ決定問題の定式化と進化計算アルゴリズムの適用

本章では, 先行研究 [9-11] と同じことを目指す最適化問題を, 単純な構造を持つ問題として定式化し直すことを試みる. 3.1 節で「重み付き・ピーク移動型記録モデル」に対する新たなパラメータ決定問題を定式化し, 3.2 節では進化計算アルゴリズムを用いてこの問題を解いた数値例を示す.

### 3.1 連続変数大域的最適化問題としての定式化

まず, 独立な決定変数は重みベクトル  $\boldsymbol{\xi}$  とピーク位置  $\mathbf{x}_{\max}$  であり, どちらも連続変数である. 先行研究では, これ以外の連続値あるいは離散値の独立変数を導入したが, 本章の問題では  $\boldsymbol{\xi}$  と  $\mathbf{x}_{\max}$  だけに限りたい.

次に, パラメータ決定の目的について検討する. 「正確に記録されるパターンの個数」を求めるために, 変数

$$\omega_q = \begin{cases} 1, & \min\{\boldsymbol{\mu}_q^*\} > 0 \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (10)$$

を導入する.  $\eta_q^*$  は ( $W$ ,  $\boldsymbol{\theta}$  を介して)  $\boldsymbol{\xi}$  と  $\mathbf{x}_{\max}$  の従属変数であり,  $\omega_q$  も同様である. (10) 式中の不等式  $\min\{\boldsymbol{\mu}_q^*\} > 0$  は (9) 式を書き換えたものであるが, 記録を確実なものとするために等号を除いた. 言い換えれば,  $\omega_q = 1$  ならばパターン  $q$  が正確に記録され,  $\omega_q = 0$



ならばそうではない（少なくとも1ビット以上の誤りがある）。このとき、「正確に記録されるパターンの個数」は、次式の関数

$$f_1(\xi, \mathbf{x}_{\max}) = \sum_{q=1}^Q \omega_q \quad (11)$$

によって与えることができる。

しかしながら、(11)式の $f_1$ は整数値しかとらないため、これを目的関数に選ぶと多くの解が同じ評価値を持ち、数値的最適化手法では探索が進まない<sup>1</sup>。そこで、 $\mu_q^*$ に関する情報も目的関数に組み込むことを考える。

**Case 1: 一部のパターンが正しく記録されていない場合**  
これは、(10)式でも用いた値

$$\eta_q = \min\{\mu_q^*\} \quad (12)$$

と、その値が負であるパターンの番号集合

$$\mathcal{Q}^- = \{q \mid \eta_q < 0\} \quad (13)$$

を定義したとき、 $\mathcal{Q}^- \neq \emptyset$ となる場合として定義される。

このとき、 $q \in \mathcal{Q}^-$ のパターンに対して $\eta_q$ の値を増加させるべきことは明らかであり、例えば

- $\eta_q$ の総和 ( $\sum_{q \in \mathcal{Q}^-} \eta_q$ )
- $\eta_q$ の最小値 ( $\min_{q \in \mathcal{Q}^-} \{\eta_q\}$ )
- $\eta_q$ の最大値 ( $\max_{q \in \mathcal{Q}^-} \{\eta_q\}$ )

などを目的関数に組み込むことができる。さらに検討を進めた結果、以下の考え方

- 正しく埋め込まれないパターンに対しては $\eta_q$ がどのような（負の）値になっても構わないので、c)の最大値だけを増加させればよい。この値を正になるまで増加させれば正確に記録されるパターンの個数を増やすことにつながるため、「正確に記録される可能性が最も高いパターン」の記録失敗を優先的に解消するアプローチであるともいえる。

を採用することとした<sup>2</sup>。

さらに、(10)式の $\omega_q$ と(12)式の $\eta_q$ の間でスケールが大きく異なる問題についても検討し、以下の考え方

- c)で与えられる $\eta_q$ の最大値がどれだけ増加しようが、正確に記録されたパターンの個数が増加する ( $\sum_{q=1}^Q \omega_q$ の値が1だけ増加する) ことのほうが重要である。従って、 $\eta_q$ の最大値 $\max_{q \in \mathcal{Q}^-} \{\eta_q\} \in (-\infty, 0)$ を区間 $(0, 1)$ に変換することによって、重要性の違いを考慮しながらスケールを統一する。

を採用した。このような性質を持つ関数の一例として、

$$f_2(\xi, \mathbf{x}_{\max}) = \begin{cases} \exp\left(\max_{q \in \mathcal{Q}^-} \{\eta_q\}\right), & \mathcal{Q}^- \neq \emptyset \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (14)$$

<sup>1</sup>紙面の都合から詳細は割愛するが、PSOやDEを適用した場合でこのような現象を確認している。

<sup>2</sup>a)やb)の利用も検討した結果である。数値実験を行い、a)やb)を利用した場合は全ての $\eta_q$ の値が0に近づく傾向が見られ、「正確に記録されるパターンの個数」を増やすことにさほど寄与しないことを確認している。

を与えることができる。

**Case 2: 全てのパターンが正確に記録されている場合**

これは、(13)式を用いて $\mathcal{Q}^- = \emptyset$ となる場合である<sup>3</sup>。このとき、全パターンを確実に記録することを期待して、 $\eta_q$ の最小値 ( $\min_{q \in \mathcal{Q}^-} \eta_q$ )を最大化することを試みる<sup>4</sup>。そのための関数として、

$$f_3(\xi, \mathbf{x}_{\max}) = \begin{cases} \min_{q \in \mathcal{Q}^-} \{\eta_q\}, & \mathcal{Q}^- \neq \emptyset \\ 0, & \text{otherwise} \end{cases} \quad (15)$$

を与えることができる。

上記の議論を整理し、Case 1とCase 2が排他的であることにも注意すると、「重み付き・ピーク移動型記録モデル」に対するパラメータ決定問題は、以下の連続変数最適化問題

$$\max_{\xi, \mathbf{x}_{\max}} f(\xi, \mathbf{x}_{\max}) = f_1(\xi, \mathbf{x}_{\max}) + f_2(\xi, \mathbf{x}_{\max}) + f_3(\xi, \mathbf{x}_{\max}) \quad (16a)$$

$$\text{subj. to Eq. (5), } \mathbf{x}_{\max} \in [0, 1]^N \quad (16b)$$

として定式化することができる。

(16)式の問題は $Q+N$ 個の独立変数を持ち、不連続な目的関数を持つ。制約条件の構造は比較的単純であるが、目的関数は微分不可能であり、複雑な形状を持つことが予想されるので、PSOやDEなどの進化計算アルゴリズムを用いて解く必要がある。

### 3.2 数値例

本節では、極めて簡単な数値例であるが<sup>5</sup>、以下に示す5ビットのパターン5個

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_1 &= [0, 0, 0, 0, 0]^T, & \mathbf{p}_2 &= [1, 0, 0, 0, 0]^T \\ \mathbf{p}_3 &= [0, 0, 0, 0, 0]^T, & \mathbf{p}_4 &= [1, 0, 0, 0, 0]^T \\ \mathbf{p}_5 &= [0, 0, 0, 0, 0]^T \end{aligned} \quad (17)$$

を記録することを考える。 $Q=5$ 、 $N=5$ の例題である。

これらのパターンに対して(2)式の記録モデルを適用すると

$$W_0 = \begin{bmatrix} 0.25 & 0.05 & 0.05 & 0.05 & 0.15 \\ 0.05 & 0.25 & 0.05 & 0.05 & 0.15 \\ 0.05 & 0.05 & 0.25 & 0.05 & 0.15 \\ 0.05 & 0.05 & 0.05 & 0.25 & 0.15 \\ 0.15 & 0.15 & 0.15 & 0.15 & 0.25 \end{bmatrix} \quad (18a)$$

$$\theta_0 = [0.275, 0.275, 0.275, 0.275, 0.425]^T \quad (18b)$$

<sup>3</sup>厳密には $\min_{q \in \mathcal{Q}^-} \{\eta_q\} = 0$ を分ける必要があるが、大きな影響がないため便宜的に扱っている。

<sup>4</sup>(9)式においては $\mu_q^*$ や $\eta_q$ の値の符号が意味を持ち、値自体が持つ意味は解釈されていない。期待する効果の有無は不明であるが、少なくとも決定変数 $\xi$ や $\mathbf{x}_{\max}$ を一意に決定するために、このような考え方を導入する。

<sup>5</sup>追加実験では、文献[11]の例題で、 $16 \times 16$ ドット(256ビット)で表現されたデジタル数字10個を記録することも試みた。しかし、PSOやDEで粒子数/個体数を500程度に設定して(16)式の問題を解いても、5個程度のパターンまで正確に記録した後に探索が停滞し、文献[11]より劣る結果しか得られなかった。 $Q=10$ 、 $N=256$ であり決定変数が266個あり、目的関数の形状も複雑であるため、PSOやDEにとって解き難い問題になっていたことが考えられる。この例題については検討を進め、別の機会でご報告したい。

となる。記録結果を調べるために (10) 式の  $\omega_q$  と (11) 式の  $\eta_q$  を計算すると、

$$\omega_1 = 1, \quad \omega_2 = \dots = \omega_5 = 0 \quad (19a)$$

$$\eta_1 = 0.275, \quad \eta_2 = \dots = \eta_5 = -0.025 \quad (19b)$$

となり、 $\mathbf{p}_1$  だけが正確に記録されている。さらに  $\boldsymbol{\mu}_q^*$  の値を調べると、 $\mathbf{p}_2$  では左から 3 番目のビット、 $\mathbf{p}_3$  では 4 番目のビット、 $\mathbf{p}_4$  では 5 番目のビット、 $\mathbf{p}_5$  では 2 番目のビットが誤って記録されている。

一方、 $c = 1/Q$  とおいた (4) 式の記録モデルを考え、(16) 式の問題を PSO<sup>6</sup>あるいは DE<sup>7</sup>を用いて解いてパラメータを決定した。決定変数は 10 個であり、個体数／粒子数を 30 程度に設定すれば両手法とも数百世代で最適解を求めることができた。実際に得られた最適解は

$$\boldsymbol{\xi} = [0, 0.2763, 0.2237, 0.3123, 0.1877]^T \quad (20a)$$

$$\mathbf{x}_{\max} = [0.6483, 0.9528, 0.7840, 0.9968, 0.4313]^T \quad (20b)$$

であり、対応する目的関数値は  $f(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}_{\max}) = 5.025$  であった。(20) 式の結果を用いた記録モデルは (21) 式で与えられる。さらに、

$$\omega_1 = \dots = \omega_5 = 1 \quad (22a)$$

$$\eta_1 = \dots = \eta_5 = 0.025 \quad (22b)$$

となり、全てのパターンが正確に記録されていることがわかる。この数値例から、「重み付き・ピーク移動型記録モデル」の有用性、および本論文のパラメータ決定問題の定式化の妥当性が確かめられた。

#### 4 記録モデル決定問題の定式化と実行可能化演算を伴う進化計算アルゴリズムの適用

本章では、(4) 式をさらに一般化したモデル

$$\mathbf{W} \in \mathbb{R}^{N \times N} : \text{positive definite/semidefinite} \quad (23a)$$

$$\boldsymbol{\theta} = \mathbf{W} \mathbf{x}_{\max} \quad (23b)$$

を考える。これまで、 $\mathbf{W}$  を与えるために常に記録パターン  $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_Q$  によって構成される実対称行列の (重み付き) 和を考えていたが、その要素も全てパラメータ化し、 $\mathbf{W}$  と  $\boldsymbol{\theta}$  を選択する自由度を高める。(23) 式の形で与えられる  $\mathbf{W}$  と  $\boldsymbol{\theta}$  を最適に決定することは、数ある候補の中から記録モデル自体を最適に選択することを意味する。また、このように選択されたモデルの比較を通して、従来考えてきたモデルの有用性を検討することにも役立つと期待される。

4.1 節では、 $\mathbf{W}$  の対称性や正定／半正定性を考慮したパラメータ決定問題を定式化し、4.2 節では実行可能化演算を伴う進化計算アルゴリズムを適用した数値例を示す。

<sup>6</sup>標準的な速度更新式を用い、全体最良解 (global best) を群全体で共有するモデルを使用し、パラメータ設定は  $w = 0.729$  (inertia weight),  $c_1 = c_2 = 1.49445$  (cognitive and social parameters) とした。

<sup>7</sup>DE/rand/1/bin モデルを使用し、パラメータ設定は  $F = 0.5$  (scaling factor),  $CR = 0.9$  (crossover rate) とした。

#### 4.1 問題の定式化

(23) 式のモデルで、行列  $\mathbf{W}$  が実正定／半正定値行列であるためには、 $\mathbf{W}$  が実対称行列である必要がある。 $N$  次元正方形行列  $\mathbf{W}$  は  $N^2$  個の要素を持つが、実対称性ゆえ独立な要素は  $N(N+1)/2$  個に絞られる。例えば、 $N$  次元下三角行列を与え、対角線に関して対称に折り返すようにして上三角成分に値をコピーすることによって実対称行列で構成することができる。従って、行列  $\mathbf{W}$  の独立な要素を適切に並べたベクトルを  $\mathbf{w} = [w_1, \dots, w_{N(N+1)/2}]^T \in \mathbb{R}^{N(N+1)/2}$  と表し、パラメータ決定問題の独立変数として用いることにする。

一方、 $\mathbf{W}$  が実対称行列であるならばその固有値は実数であるので、その固有値を  $\lambda_1, \dots, \lambda_N \in \mathbb{R}$  と表せば、正定／半正定性の条件は

$$\min\{\lambda_n\} \geq 0 \quad (24)$$

で与えられる。

本章の問題では、決定変数が  $\mathbf{w}$  と  $\mathbf{x}_{\max}$  に変わっているが、目的関数は 3.1 節で考えたものを利用すればよい。そこで、(11) 式の  $f_1$ 、(14) 式の  $f_2$ 、(15) 式の  $f_3$  で右辺の形は変えず、左辺の独立変数  $(\boldsymbol{\xi}, \mathbf{x}_{\max})$  を  $(\mathbf{w}, \mathbf{x}_{\max})$  に読み替えた関数を用いれば、(23) 式のモデルに対するパラメータ決定問題は、以下の連続変数最適化問題

$$\begin{aligned} \max_{\mathbf{w}, \mathbf{x}_{\max}} \quad & f(\mathbf{w}, \mathbf{x}_{\max}) = f_1(\mathbf{w}, \mathbf{x}_{\max}) + f_2(\mathbf{w}, \mathbf{x}_{\max}) \\ & + f_3(\mathbf{w}, \mathbf{x}_{\max}) \end{aligned} \quad (25a)$$

$$\text{subj. to Eq. (24), } \max\{|w_n|\} = w_0,$$

$$\mathbf{x}_{\max} \in [0, 1]^N \quad (25b)$$

として定式化することができる。ただし、(25b) 式中の  $\max\{|w_n|\} = w_0$  は行列  $\mathbf{W}$  の要素の絶対値の最大値を  $w_0$  に指定する規格化条件であり、 $w_0 > 0$  は正定数とする。

(25) 式の問題は、3 章で定式化した (16) 式の問題と比べると制約条件の構造が複雑であり、特に  $\mathbf{W}$  の正定／半正定性条件はその固有値を用いて評価する必要がある (正定／半正定性を満たすように  $\mathbf{W}$  を作り込んでいく必要がある)。そこで、この問題に対しては、特に「実行可能化演算を伴う」進化計算アルゴリズムを用いた解法 [16] の適用を考える<sup>8</sup>。

<sup>8</sup>本論文の主題ではないが、文献 [16] では、一般的な制約条件付き最適化問題  $\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x})$  subj. to  $\mathbf{g}(\mathbf{x}) \leq \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  を解くとき、制約関数  $\mathbf{g}$  や  $\mathbf{h}$  の形が陽に記述される場合に、

- (a) 実行可能解 (わずかな制約条件の侵害を許容することもある) 同士の比較においては目的関数  $f$  の優れた解、(b) 実行不能解同士の比較においては制約侵害量 (例えば、 $p(\mathbf{x}) = \sum_j \max\{g_j(\mathbf{x}), 0\} + \sum_m |h_m(\mathbf{x})|$  のように評価される) が少ない解、(c) 実行可能解と実行不能解との比較においては実行可能解、を選択するようにして、既存の進化計算アルゴリズムによって解を更新する操作

だけでなく、

- 制約関数によって与えられる非線形連立方程式  $\max\{\mathbf{g}(\mathbf{x}), \mathbf{0}\} = \mathbf{0}$ ,  $\mathbf{h}(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$  を非線形ソルバーを用いて解くことを通して、解の実行可能性を高める ( $p(\mathbf{x})$  の値を減少させる) 操作、

を交互に実行する方法が提案されている。結果として、探索序盤は探索点を実行可能化させるための探索、その後は実行可能集合上で目的関数値を改善するための (実質的に制約を考慮する必要のない) 探索が行われる。(25) 式の問題では  $\mathbf{W}$  の正定／半正定性を作り込む必要があるため、このような手法が有効であると期待される。

(3.2 節で求めたモデル)

$$W_1 = \begin{bmatrix} 0.05 & 0.03123 & -0.02237 & -0.02763 & 0.01877 \\ 0.03123 & 0.05 & -0.00360 & -0.00886 & 0 \\ -0.02237 & -0.00360 & 0.05 & 0 & 0.00886 \\ -0.02763 & -0.00886 & 0 & 0.05 & 0.00360 \\ 0.01877 & 0 & 0.00886 & 0.00360 & 0.05 \end{bmatrix} \quad (21a)$$

$$\theta_1 = [0.025, 0.05623, 0.025, 0.025, 0.04377]^T \quad (21b)$$

(4.2 節で求めたモデル (例 1))

$$W_2^1 = \begin{bmatrix} 0.04971 & 0.01256 & -0.01445 & -0.00951 & 0.01797 \\ 0.01246 & 0.04953 & 0.00164 & -0.01128 & -0.00466 \\ -0.01445 & 0.001644 & 0.05 & -0.00086 & 0.00994 \\ -0.00951 & -0.01128 & -0.00086 & 0.05 & -0.00302 \\ 0.01797 & -0.00466 & 0.00994 & -0.00302 & 0.05 \end{bmatrix} \quad (26a)$$

$$\theta_2^1 = [0.01723, 0.03619, 0.02414, 0.02414, 0.04120]^T \quad (26b)$$

(4.2 節で求めたモデル (例 2))

$$W_2^2 = \begin{bmatrix} 0.04950 & 0.01375 & -0.01325 & -0.02086 & 0.02296 \\ 0.01375 & 0.04589 & -0.00343 & -0.00941 & -0.01388 \\ -0.01325 & -0.00343 & 0.05 & -0.00399 & 0.00078 \\ -0.02086 & -0.00941 & -0.00399 & 0.05 & 0.00380 \\ 0.02296 & -0.01388 & 0.00078 & 0.00380 & 0.04775 \end{bmatrix} \quad (27a)$$

$$\theta_2^2 = [0.02943, 0.03068, 0.02101, 0.02102, 0.03741]^T \quad (27b)$$

## 4.2 数値例

3.2 節の例題を再び取り上げる。\$N = 5\$ に対応して (25) 式の問題は 20 個 (\$\mathbf{w}\$ で 15 個, \$\mathbf{x}\_{\max}\$ で 5 個) の決定変数を持つ。

(21) 式の結果と比較しやすいように \$w\_0 = 0.05\$ と設定し、実行可能化演算を伴う PSO や DE を用いて (25) 式の問題を解いたところ、目的関数値が \$f(\mathbf{w}, \mathbf{x}\_{\max}) = 5.025\$ となる解が数多く得られた。例として、2 通りの最適解に対応する \$W\$, \$\theta\$ を、(26) 式と (27) 式にそれぞれ示す。

両方の記録モデルに対して \$\omega\_1 = \dots = \omega\_5 = 1\$ であり、全てのパターンが正確に記録されている。一方、(26) 式のモデルに対して

$$\eta_1 = \dots = \eta_3 = 0.025, \eta_4 = 0.02590, \eta_5 = 0.02677 \quad (28)$$

(27) 式のモデルに対して

$$\eta_1 = \dots = \eta_3 = 0.025, \eta_4 = 0.02834, \eta_5 = 0.03081 \quad (29)$$

となり、特に \$\eta\_4\$ と \$\eta\_5\$ の値に違いがある<sup>9</sup>。

結果について考察すると、まず (25) 式の問題が多数の最適解を持つことは、関数 \$f\_3\$ を設計するときに「全てのパターンが正確に記録されている場合には、\$\eta\_q\$ の最小値 (\$\min\_{q \in \mathcal{Q}} \{\eta\_q\}\$) を最大化する」と考えたため、それ以外の \$\eta\_q\$ の値が変動することが許容され、解が一意に定まらないことは自然なこととして理解できる。

<sup>9</sup>他に得られた解も、\$\eta\_1 = \dots = \eta\_3 = 0.025\$ となるのに対し \$\eta\_4\$ と \$\eta\_5\$ の値にばらつきが見られた。

その上で、前節の (22b) 式と本節の (28), (29) 式を比べたとき、後者では \$\eta\_4\$ と \$\eta\_5\$ が 0.025 を上回っている。これは、記録モデルの自由度を高めることによってその記録能力が高められる可能性を示唆している。また、行列 \$W\$ の構造に着目すると、(22a), (26a), (27a) 式の全てにおいて対角成分の値が 0.05 に (ほぼ) 等しいという共通点があり、各要素の符号もおおむね一致している。ベクトル \$\theta\$ についても、第 3 成分と第 4 成分の値が (ほぼ) 等しいなどの特徴が見出される。従って、記録能力の高さが似通ったモデルは、ある種の共通の構造や性質を具備すると予想することができる。

一例の数値実験から過度な期待を抱くべきではないが、モデル自体を最適決定するアプローチによって、単に有用なモデルが得られるだけでなく、その背景を理解するために有益な手がかりも与えられる。このような情報を検討し、今後の研究に活用することが望まれよう。

## 5 おわりに

本論文では、自己相関連想記憶の記録能力に関するこれまでの研究を振り返り、文献 [8] を契機として文献 [10] で提案した記録モデル(「重み付き・ピーク移動型記録モデル」)のパラメータ決定問題の定式化を見直し、単純な構造の連続変数大域的最適化問題に書き換えることを試みた。そして、進化計算アルゴリズムの代表例である PSO および DE を適用して、その解を直接的に探索することを可能にした。数値例を通して新たな定式化の正当性を確認した。

さらに、記録モデルの要素を全てパラメータ化して自由度を高め、モデル自体をある意味で最適に選択する方法も提案した。ここでは、行列の性質（正定/半正定性）に関する制約条件を伴う最適化問題を解いてパラメータを決定することが求められるため、「実行可能化演算を伴う」PSOやDEを用いた解法の適用を試みた。数値実験によって、このように拡張したパラメータ決定問題の最適解が妥当な性質を具備することを確認した。また、モデルの構造や特徴と記録能力の間に関係があることを示唆する結果も得られた。

今後、大規模・複雑な記録問題への取り組みを継続するほか、数値実験を重ねて得られた知見を整理し、数学的・物理的・情報学的な解釈を与え、更に有用な記録モデルの開発、および記録メカニズムの本質的な理解を目指したい。

## 謝辞

本研究は、日本学術振興会科学研究費補助金（若手研究(B), 課題番号 25870839)の助成を受けたものです。

## 参考文献

- 1) J. A. Anderson: “A simple Neural Network Generating an Interactive Memory”, *Mathematical Biosciences*, Vol. 14, pp. 197–220, 1972.
- 2) T. Kohonen: “Correlation Matrix Memories”, *IEEE Trans. Computers*, Vol. C–21, No. 4, pp. 353–359, 1972.
- 3) K. Nakano: “Associatron – A Model of Associative Memory”, *IEEE Trans. Systems, Man, and Cybernetics*, Vol. SMC–2, No. 3, pp. 380–388, 1972.
- 4) J. J. Hopfield: “Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities”, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, Vol. 79, pp. 2554–2558, 1982.
- 5) 増田和明, 相吉英太郎: 「連想記憶モデルのカオス特性とその動的連想記憶への応用」, 第20回インテリジェント・システム・シンポジウム (FAN 2010) 講演論文集, 論文番号 S1-4-1, 2010.
- 6) K. Masuda and E. Aiyoshi: “On the Memorization Accuracy of Autoassociative Memory Models”, *Proc. SICE Annual Conference 2011 (SICE 2011)*, pp. 530–536, 2011.
- 7) 福井文平, 増田和明, 栗原謙三: 「自己連想記憶の精度向上を目的とした追加記録パターンの最適生成法」, 計測自動制御学会システム・情報部門学術講演会講演論文集 2011 (SSI 2011) 講演論文集, pp. 161–166, 2011.
- 8) K. Masuda, B. Fukui and K. Kurihara: “A Weighting Approach for Autoassociative Memories to Improve Accuracy in Memorization”, *Proc. 2012 IEEE World Congress on Computational Intelligence (WCCI 2012)*, pp. 3021–3027, 2012.
- 9) K. Masuda, B. Fukui and K. Kurihara: “A Weighting Approach for Autoassociative Memories to Maximize the Number of Correctly Stored Patterns”, *Proc. SICE Annual Conference 2012 (SICE 2012)*, pp. 1520–1524, 2012.
- 10) 増田和明, 栗原謙三: 「自己相関連想記憶の記録能力を高める重み付き記録モデルとその反復的重み決定手法」, 第22回インテリジェント・システム・シンポジウム (FAN 2012) 講演論文集, 論文番号 1A-1-2, 2012.
- 11) 増田和明, 栗原謙三: 「自己相関連想記憶に対する重み付き・ピーク移動型記録モデルの改良に関する基礎検討」, 計測自動制御学会システム・情報部門学術講演会 2012 講演論文集, pp. 408–413, 2012.
- 12) R. C. Eberhart and J. Kennedy: “A New Optimizer Using Particle Swarm Theory”, *Proc. Sixth Symp. Micro Machine and Human Science*, pp. 39–43, 1995.
- 13) J. Kennedy and R. C. Eberhart: “Particle Swarm Optimization”, *Proc. 1995 IEEE Int. Conf. on Neural Networks*, Vol. IV, pp. 1942–1948, 1995.
- 14) K. Price and R. Storn: “Differential Evolution”, *Dr. Dobb's Journal*, April 97, pp. 18–24, 1997.
- 15) R. Storn and K. Price: “Differential Evolution – a Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces”, *Journal of Global Optimization*, Vol. 11, No. 4, pp. 341–359, 1997.
- 16) 増田和明: 「実行可能化演算を組み込んだ進化計算アルゴリズムによる制約条件付き最適化手法」, *電気学会論文誌 C*, Vol. 134, No. 9 (掲載決定), 2014.

# マルチタスク学習用ニューラルネットワークの サイズ過不足評価手法

○柴田淳司 董芳艶 廣田薫 (東京工業大学)

## Neural Network Size Estimation for Multi-task Learning

\* A. Shibata, F. Dong, and K. Hirota (Tokyo Institute of Technology)

**Abstract**— A neural network size estimation method for multi-task learning is proposed by clustering neurons into tasks. It clarifies a neural network design criteria and finds a suitable network structure in low computational cost. In experiments using MNIST data base, extra neurons are estimated by its position on the cluster, and a number of input data set related to the specific task is also detected by its variance on the cluster. The proposal aims to generate a neural network in optimal size structure.

**Key Words:** Neural Network, Network Structure Estimation, Multi-task Learning, Clustering

### 1. 序論

深い階層を持つニューラルネットワークを用いたマルチタスク学習において、予めネットワーク下層で特徴量を抽出するよう教師なし学習を行い、それを基に上層と合わせて学習することで高い分類精度を得る研究が行われている<sup>1,2)</sup>。そこでは、事前学習の試行繰り返し回数やニューロン数などのパラメータの明確な設計基準がなく、経験的または発見的手法で決定している。また、深い階層を持つニューラルネットワークは学習の計算コストが大きく、試行すべきネットワーク構造のパターンも考慮すると、学習には膨大な時間がかかる。

そこで、ニューラルネットワークを構成するニューロンをクラスタリングし、各クラスタのニューラルネットワーク内部処理タスクとの対応付けを試み、対応が付いたクラスタの個数及び全クラスタの分散を、マルチタスク学習時のパラメータ評価指標として用いる。その評価指標により、学習を行いながら、事前学習時の学習試行繰り返し回数と各層のサイズ過不足を判定する手法を提案する。

提案手法を用いることで、必ずしも十分な経験を有しない者でも設計基準が明確になり、与えられたマルチタスクに対応するニューラルネットワーク構造の決定を低計算コストで実現することができる。

評価実験用に MNIST データベース<sup>3)</sup>を用いて、手書き白黒数字画像の識別実験を行う。入力画像が1つの数字であると識別することを1つのタスクとし、提案手法により、計10タスクとニューラルネットワーク内部の処理対応付けを確認して各層におけるサイズを評価して、学習の進捗状況を教師データによらず評価する。

2.では、ニューロンのクラスタリングを用いたニューラルネットワークの評価手法を述べ、サイズ過不足の判定方法を提案する。3.では、手書き白黒二値数字画像識別マルチタスクでネットワークサイズ過不足と学習繰り返し回数の評価実験を行う。

### 2. ニューロンのクラスタリングと構造評価手法

#### 2.1 ニューロンの階層ネットワーククラスタリング

ニューラルネットワーク内部の処理と構造との対応付けを行うため、各層のニューロン間の相互関係を力学モデルにより2次元ユークリッド空間上に表現する (Fig.1).

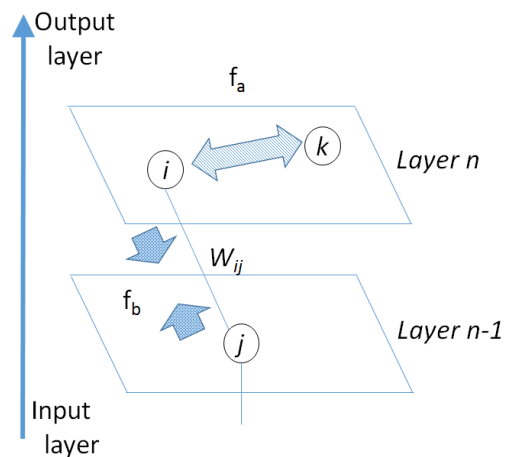


Fig. 1: 2D Euclidian representation of each layer in a neural network

その手順は、重みの正規化後、

- (1) 各ニューロンに力を与える
  - (2) ニューロンの速度、位置を更新する
- の二つのステップを速度が一定値以下になるまで繰り返す。

まず、重みとバイアスの比率が違うニューロン同士を比較できるようにするため、ニューロン*i*と*j*の結合重み $W_{ij}$ を、ニューロン*i*のバイアス $b_i$ を基に、

$$W_{ij} := \frac{W_{ij}}{1 + I(b_i)}, \quad (1)$$

$$I(x) = \begin{cases} x & \text{if } x \geq 0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (2)$$

により正規化する。これにより、 $b_i$ が負であった場合、 $W_{ij}$ は変更なく、 $b_i$ が正であった場合、その大きさに存して $W_{ij}$ の値を下げる。

次に、2つのニューロン間にかかる力を、距離 $d$ と重み $W$ を基に、引力と斥力の和によって与える。結合をバネと想定し、結合があるニューロン同士にバネによる引力 $F_a$ を、

$$F_a = \begin{cases} -Wd & \text{if } d < d_1 \\ -Wd_1 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (3)$$

により定義する。ニューロン間距離が発散しないよう引力の上限を $d_1$ により与えるが、経験的に $d_1=1$ とする。同層にあるニューロン同士に分子間力による斥力 $F_b$ を、ファンデルワールス力の3次関数近似より、

$$F_b = \begin{cases} \left( \frac{5}{4}d^3 - \frac{19}{8}d^2 + \frac{9}{8} \right) & \text{if } d < 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}, \quad (4)$$

と与える。ここで、斥力が負とならないよう $d \geq 1$ では0とする。

式(3)、(4)を基に、ニューロンの速度と位置を、

$$V := \theta[V + dt(F_a + F_b)], \quad (5)$$

$$x := x + dtV, \quad (6)$$

により更新する。ここで、 $\theta$ は減衰係数、 $dt$ は微小時間である。更新後の位置を用いて、再度ニューロンに力を加え、位置を計算する。これらのパラメータは、経験的に、減衰係数0.7、微小時間0.1、終了の閾値0.01とする。

式(3)-(6)を繰り返し、すべてのニューロンにかかる速度が閾値を下回ると終了する。

## 2.2 クラスタからのネットワークサイズ評価手法

2.1.で作成したニューラルネットワークの2Dユークリッド空間上のニューロンクラスタの配置から、各層ごとに分散を計算し、ネットワークサイズを評価する。

学習が進むにつれて重みは特定の値に収束していく。そのとき、出力に関わるニューロンは発火時に正の重みを通して次のニューロンへと信号を送っていると解釈する。2.1の2Dユークリッド空間上で、正の重みを持つニューロン同士は引き合い、近くに配置されるので、学習が進むにつれ、特定タスクに対応して発火するニューロンは集まり、クラスタを形成する。

一方で、タスクに関わりのないニューロンは結合重みが小さいため、その位置はクラスタ中心から離れたところへ移動する。

これらのことから、入力に反応して発火するニュー

ロンの2Dユークリッド空間上の分散により、学習の進捗状況を測ることにする。また、クラスタ中心から大きく外れたニューロンは、不要なニューロンと判断する。

## 3. 記号画像分類タスクにおける

### ニューラルネットワークサイズ評価実験

#### 3.1 MNIST データベースと

##### ニューラルネットワーク仕様

複数のタスクを同一のニューラルネットワークに学習させ、タスクの変化に対するネットワーク構造を提案手法により評価する実験を行う。

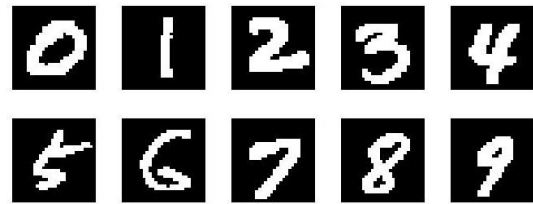


Fig. 2: 10 number image examples in MNIST dataset

実験に用いる MNIST データベース<sup>3)</sup>は、 $28 \times 28 = 784$ 画素の白黒二値による数字の画像(Fig.2)と、対応する10種類の数字ラベルから成り、それぞれの数字に対して学習用 60,000 枚(内評価用 10,000 枚)、テスト用 10,000 枚、計 70,000 枚で構成されている。入力画像が1つの数字であると識別することを1つのタスクとし、MNIST データベースを計 10 のマルチタスクで取り扱う。数字 0 から 9 の識別タスクを、タスク番号 1 から 10 に対応付ける。

ニューラルネットワークには Denoising Auto Encoder<sup>4)</sup>を使用する。そこで、指定すべき 4 パラメータとして、<sup>4)</sup>で推奨されている学習率 1、学習減衰率 0.98、慣性項 0.5、mini-batch50 を選択する。構造については、MNIST データベースに合わせて、入力層のサイズを 784、出力層のサイズを 10 に固定とする。

実験では、中間層のニューロン数と学習繰り返し回数、特定タスクのデータ数を変化させて各クラスタの形状と分散の変化を見る。

#### 3.2 学習繰り返し回数とタスク内容に対する

##### クラスタの変化観測実験

最初に、学習用データ 50,000 枚の学習繰り返し回数(epoch)に対してニューラルネットワークがどう変化していくかを見るために、ニューロン数が 784-500-200-10 の 4 層ニューラルネットワークに対し、学習繰り返し回数が 1, 5, 10, 50 の時の構造の変化を Fig.3(a), (b), (c), (d)に示す。

Fig. 3において、下から順に、入力層のニューロン 784 個、一つ目の中間層 500 個、二つ目の中間層 200 個、出力層のニューロン 10 個を配置している。また、タスクに関係あるニューロンを視覚的に観測するため、評価用データに対する発火頻度の多さ少なさを白黒の濃淡で表現している。すなわち、常に発火しているものは黒色、常に発火していないものは白色とし、これらの

ニューロンはタスクとの関係は弱いものとする。(a)では、学習が進んでいないため、どの層のニューロンも均一に並んでおり、濃淡も均一に近いことがわかる。学習が少し進んだ(b)では、色のついたニューロンが中心付近に集まり、それ以外のニューロンは押し出されて広がっている。さらに学習が進んだ(c), (d)ではそれが顕著となり、タスクに関与していない白いニューロンはより外側へと押し出されている。また、一つ目の中間層は、二つ目の中間層に比べ、発火していないニューロン数が多い。このことから、タスクとの関わり的小さいニューロンは、その配置から判別できる。

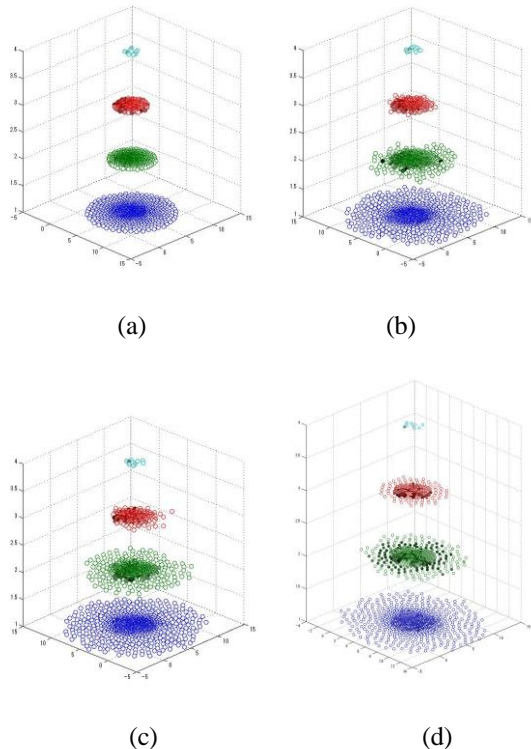


Fig. 3: Euclidean positions of neurons  
(a)epoch=1 (b)epoch=5 (c)epoch=10 (d)epoch=50

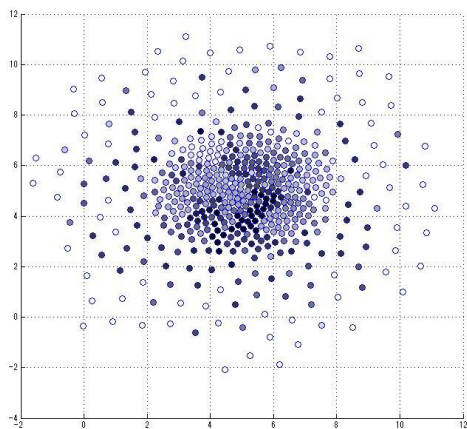


Fig. 4: Cluster on 2<sup>nd</sup> middle layer.  
クラスタの様子を詳しく見るため、Fig. 3(d)の中間層

を抜き出し、Fig. 4に示す。Fig. 4において、濃淡が均一なニューロンの集まりがあることがわかる。これは、同一のタスクに反応するニューロンの集まりであり、タスクに対応した処理を行うクラスタが生成されていることを示す。

また、各層におけるニューロン配置の分散により学習の進捗状況を評価するために、学習繰り返し回数を1から12まで変化させた場合に、タスクに反応したニューロンの2Dユークリッド空間での層毎の分散と、その時の学習誤差をFig. 5に示す。

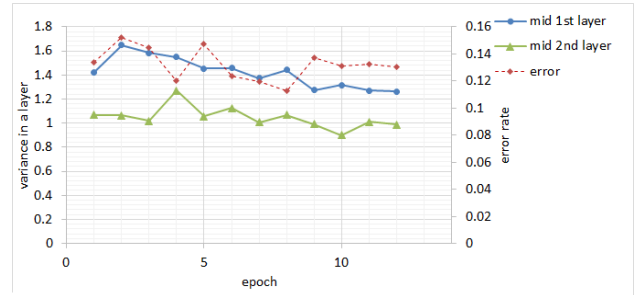


Fig. 5: Epoch-variance for each layer.

Fig. 5において、一つ目の中間層では分散は上昇後徐々に減少し、二つ目の中間層はほぼ一定の値で推移している。学習誤差も同様に、上下しながら徐々に減少をしている。このことから、学習進捗状況の細かな変化は捉えられないが、分散の変動によって教師なしの学習環境においても全体的な傾向を取らえられる。

次に、学習タスクの変化に対するクラスタの変化を見るために、一つのタスクの学習データ数のみを半減した(残り9タスクの学習データ数は保持)47,500枚の画像データを用いて学習した時に、各タスクに対するニューロンクラスタの分散がどう変化するかを調べて、特定タスクの学習データ数を半減した影響を調べる。

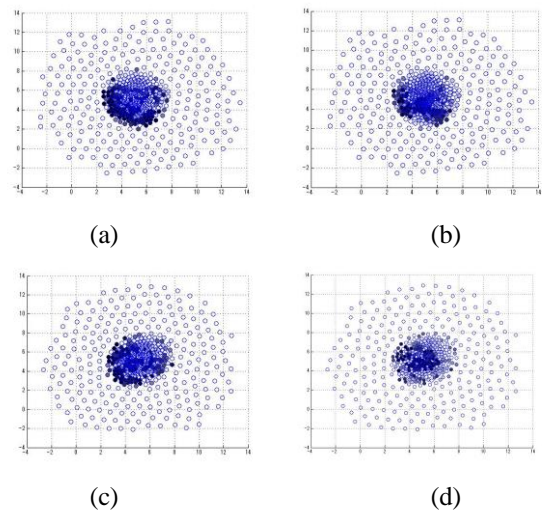


Fig. 6: Neurons on middle layer response to a particular task.

- (a) response to task1, learning with lacked task2 data,
- (b) response to task2, learning with lacked task2 data,
- (c) response to task1, learning with whole data,
- (d) response to task2, learning with whole data,

その時のニューラルネットワークの構造をFig. 6に示す。

Fig. 6において、(a), (b) は数字“1”の画像学習データ数を半減して学習した場合の一つ目の中間層の数字“0”と数字“1”に反応したニューロンの2Dユークリッド空間配置、(c), (d) はすべてのデータを用いて学習を行った場合の一つ目の中間層の数字“0”と数字“1”に反応したニューロンの2Dユークリッド空間配置である。(a), (b)は、学習そのものがあまり進んでいないため、(c), (d)に比べ、どのタスクに対しても分散が大きい。Fig.6(a), (b)において、学習データ数を半減した一つのタスク(タスク2)が作るクラスタと学習データ数を保持した残りの9タスクが作るクラスタの差を見るために、学習繰り返し回数に対する、タスク1(数字“0”の識別)とタスク2(数字“1”の識別)に反応したニューロンの分散及び全10タスクに反応したニューロンの分散の平均を、Fig.7に示す。Fig.7において、学習データ数の少ない数字“1”の画像の識別(タスク2)に関わるニューロンの2Dユークリッド空間配置は、タスクに関わる全てのニューロンの分散の平均よりも15%程広く分布している。このことから、タスク間のデータ数の割合をそのニューロンの分散により推察できる。

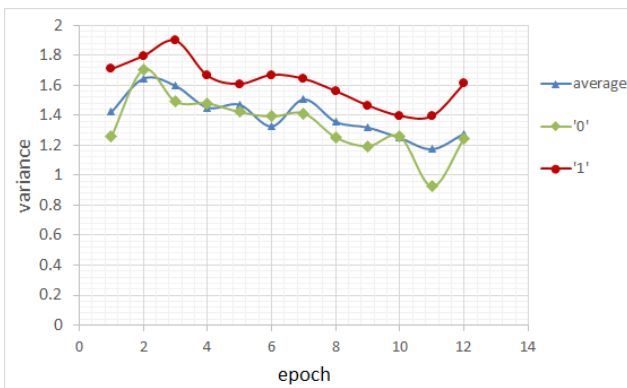


Fig. 7: Epoch-variance for fig.6(a) (b) and average of 10 tasks

以上の実験では、CPU i7(3.5GHz), RAM 8MB, MATLAB の環境で、ニューロンサイズ784-500-250-10のニューラルネットワークを50epoch学習するために3時間以上(3h13m26sec), その時のクラスタリングに3分程度(143sec)の計算時間がかかる。試行錯誤的に学習を繰り返す場合には、より学習に適したネットワークサイズを発見するために、ニューロンサイズの種々の組み合わせに対して、さらに長時間の学習計算時間が必要となる。一方で、提案手法により各層のサイズの大小を評価して設計する場合、一度学習したニューラルネットワークのクラスタリング結果を基に、次に試行すべきネットワークサイズを推察できるので、学習にかかる時間を大幅に削減できる。

#### 4. 結論

MNIST データベースを用いた数字識別実験では、提案手法により作成したニューロンのクラスタとタスク

とを比較して、学習繰り返し回数によるニューロンクラスタの変化と、学習中に使用しない不要なニューロンをその 2D ユークリッド空間上の位置により判別している。また、各タスクのデータ数を変化させたときのクラスタの変化を、タスクの学習データ数を半減したときの分散が15%程上昇することにより確認している。

以上の実験は、一般的な文字画像識別マルチタスクを学習するニューラルネットワークについて、教師の有無に関わらず、その学習進捗状況とネットワークサイズの評価、タスク間の関係を明らかにして、必ずしも十分な経験がなくても、ニューラルネットワーク構造を比較的容易に低計算コストで決定するための指針を与えている。

本提案手法により、ニューラルネットワークの構造評価手法が明示されているので、ニューロン数を動的に増減し、同時に学習すべきニューロンを同定することにより、今後は、適切なニューロン数を持つニューラルネットワークの設計方針の確立を目指したい。

#### 参考文献

- 1) Bengio, Lamblin, Popovici, et al. : Greedy Layer-Wise Training of Deep Networks, Advances in Neural Information Processing Systems 19, 153/160 (2007)
- 2) Huang, : Multi-task deep neural network for multi-label learning, 2012 Image Processing (ICIP), 2013 20th IEEE International Conference on (2013)
- 3) LeCun, Cortes, Burges : THE MNITS DATABASE, <http://yann.lecun.com/exdb/mnist/>
- 4) Palm : Deep Learning Toolbox, <https://github.com/rasmusbergpalm/DeepLearnToolbox>



# Analysis on Parameter Sensitivity of the Simplest Self-Organizing Classifiers

Danilo V. Vargas, Hirotaka Katano and Junichi Murata (Kyushu University)

**Abstract**— Self-organizing classifiers (SOC) were able to solve very difficult problems not solved yet by any other learning classifier systems. However, nothing has been stated about their parameter sensitivity. Experiments show that SOC is only slightly affected by changes in the discount factor. Moreover, when keeping the same number of individuals, experiments show that there is a trade-off between accuracy and learning time when changing the granularity.

**Key Words:** Self Organizing Classifiers, Parameter Sensitivity, Learning Classifier Systems.

## 1 Introduction

Learning Classifier Systems (LCS) have been developed for quite some time. They are methods inspired by evolution which use a population of individuals (solutions) which cooperate and compete with each other<sup>6),3)</sup>. Their applications range from unsupervised learning<sup>5)</sup> to supervised learning and reinforcement learning problems. Different from most reinforcement learning algorithms, however, LCS algorithms do not use state-action look-up tables to predict payoff. To solve RL problems, LCS systems use a set of individuals with condition-action-prediction rules, i.e., solving the problem with piecewise approximations<sup>2)</sup>.

Recently, a new family of LCS called Self-Organizing Classifiers (SOC) were proposed. They are evolutionary machine learning methods with a structured population which were applied to complex continuous input - continuous output mazes (some of them changed in form and size throughout time), supervised learning, pole balancing and mountain car problems<sup>8,7)</sup>. In fact, they were the only LCS able to solve complex continuous input - continuous output mazes.

However, nothing has been said about the parameter sensitivity of SOC's systems. Here we test the sensitivity of the Simplest Self-Organizing Classifier 2 to variations in the discount factor and state granularity (input partition). Tests were made in complex mazes with relatively big and normal sizes. The importance of having an algorithm that is not sensitive to the parameters comes from problems where, for example, strong changes happen from time to time and therefore it is necessary for the chosen parameters to still enable the algorithm to work. The sensitivity of an algorithm also reflects how easy it is to select a good setting of parameters for it, therefore it is related with the easy of use of the algorithm.

## 2 Simplest Self-Organizing Classifier

Simplest Self-Organizing Classifier 2 (SSOC2) uses a parameterless Self-Organizing Map (SOM) structured population. Therefore, the individuals are organized inside the cells of parameterless SOM.

Figure 2 display the SSOC2's structure. The schematic of SSOC2 is shown in Figure 1. In the schematic one can see the input array being received by the parameterless SOM. The cell with the weights closest to the input win the competition and a random individual from inside this cell's subpopulation goes to the action set. Subsequently, this individual acts on the environment and its fitness is used to update the individual which acted in the previous cycle.

This procedure will be explained in details in the following subsections. Before explaining its details, both the parameterless SOM and the fitness scheme will be explained.

### 2.1 Parameterless Self-Organizing Map

Parameterless SOM is an algorithm capable of creating a projection of the possibly higher dimensional input into lower n-dimensional space<sup>1)</sup>. One of its advantages over other SOM algorithms is the ability to continue learning when relatively novel input is given. It also preserves the topological relationship of the input in the constructed map as most of the SOM based methods do.

For every input  $x$  the grid of weights  $w_i$  compete for it (the closest weight wins the competition, i.e., the weight having minimum  $\|x - w_i\|$ ). After the winning cell is decided, all cells in the grid are updated by:

$$\Delta w_i(t) = \epsilon(t) h_{i,c} \{x(t) - w_i(t)\} \quad (1)$$

$$w_i(t+1) = w_i(t) + \Delta w_i(t). \quad (2)$$

where  $\Delta w_i(t)$  is the weight update in the current iteration  $t$ ,  $\epsilon$  is the learning rate and  $h_{i,c}$  is the neighborhood function.  $x$  and  $w_i$  are respectively the input array and the weight of a given cell  $i$  when the winning cell index is  $c$ . The learning rate  $\epsilon$  is defined as:

$$r(0) = \|x(0) - w_c(0)\| \quad (3)$$

$$r(t) = \max(\|x(t) - w_c(t)\|, r(t-1)) \quad (4)$$

$$\epsilon(t) = \frac{\|x(t) - w_c(t)\|}{r(t)}, \quad (5)$$

where  $w_c$  is the SOM winning cell's weight array. By considering  $dist(i, c)$  the distance between cell  $i$  and the winner cell  $c$ , the following equation holds true:

$$\Theta(\epsilon(t)) = \epsilon(t) \theta_{max}, \Theta(\epsilon(t)) > \theta_{min} \quad (6)$$

$$h_{i,c} = e^{-\frac{dist(i,c)^2}{\Theta(\epsilon(t))^2}}, \quad (7)$$

where  $\theta_{max}$  and  $\theta_{min}$  are respectively the maximum and minimum of  $\Theta(\epsilon(t))$ . In this article,  $\theta_{max}$  equals to the SOM's area (width multiplied by the height of the grid) and  $\theta_{min} = 1$  are used. This SOM is classified as parameterless because the  $\epsilon$  is derived from the current sample's novelty and not some decaying learning function (the case for the original SOM). Consequently, the parameterless SOM can still learn after a very long time has passed, provided that the input is novel enough. This characteristic is of great importance for adaptive algorithms.

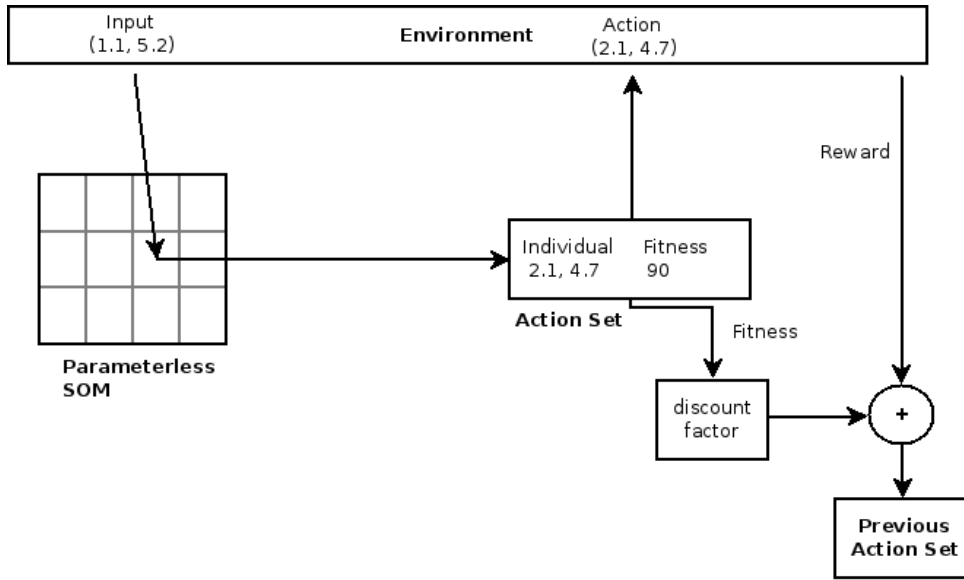


Fig. 1: Schematic of the SSOC2.

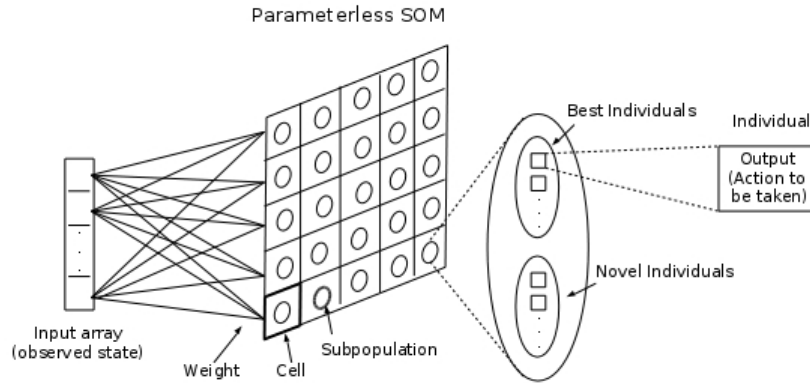


Fig. 2: SSOC2's structure.

## 2.2 Fitness

The fitness of every individual which acts on the environment has its fitness updated by the Widrow-Hoff rule <sup>9)</sup>:

$$F = F + \eta(\hat{F} - F), \quad (8)$$

where  $\eta$  is the learning rate,  $F$  is the current fitness and  $\hat{F}$  is a new fitness estimate. The new fitness estimate is given by a Q-learning based reinforcement scheme. Therefore, given an arbitrary classifier  $c$  activated at its SOM's cell  $cell$ , the fitness estimate of the pair  $(cell, c)$  which were activated at time  $t - 1$  is given by:

$$\hat{F}(c, cell)_{t-1} = R_{t-1} + \gamma \max_{c' \in cell'} \{F(c', cell')\}, \quad (9)$$

where  $R$  is the reward received,  $\gamma$  is the discount-factor,  $\max_{c' \in cell'} \{F(c', cell')\}$  is the maximum fitness inside the activated cell  $cell'$  at the current cycle  $t$  and  $c'$  is a classifier which has the current highest fitness in  $cell'$ . Notice that with this rule the individual is updated only for the given cell even if the individual is present

## 2.3 Procedure

In SSOC2, classifiers code directly the action by an array of real numbers, i.e., the model is an array of real numbers representing the output.

Each subpopulation is inside a cell of the parameterless SOM. The SOM population has two groups of individuals inside its subpopulation: best individuals and novel individuals. Best and novel individuals have a fixed size of  $\beta$  and  $\nu$  respectively. The initial population does not have any classifiers. Classifiers are created when the respective cell wins the competition inside the SOM.

The next subsection details how the Evolution happens.

## 2.4 Evolution

The evolutionary algorithm is called locally in each cell when the cell's experience is greater than  $\iota S$  (every cycle a cell's individual acts, this cell has its experience counter increased).  $S$  is the number of subpopulation individuals (novel plus best individuals) present on each cell and parameter  $\iota$  defines an experience per individual, above which they should have an accurate fitness evaluation. The evolution of the

Table 1: SSOC2’s Cycle

When an input is received by the system, start a cycle (exploration cycle if the past was an exploitation cycle and vice-versa):

1. The SOM population is activated on the input.
  - (a) The cell’s weight array which is closest to the received input wins the competition.
  - (b) Inside the winning cell, a random individual is chosen either from the novel group or from the best group (depending if it is an exploration or exploitation cycle).
  - (c) The cell’s weight array of the SOM population is updated by the SOM algorithm.
  - (d) Return the chosen individual.
2. The chosen individual acts on the system.
3. Update the fitness of the individual that acted in the previous cycle.
4. Check if the evolutionary algorithm (EA) should be called. If positive, execute the EA.

cell is reset after the evolution has been applied.

The evolution procedure consists of first sorting the individuals of the given cell according to their fitness. Subsequently, the current best  $\beta$  individuals substitute the previous best individuals, discarding the remaining individuals.  $\nu$  novel individuals are created using one of the following (with equal chance of happening):

1. Indexing - A copy from (index to) a randomly selected individual of the entire population;
2. Reproduction - Result from applying the differential evolution operator (the three vectors of the mutant vector comes from the SOM’s entire population of individuals)<sup>4)</sup>.

### 3 Experiments

When not specified otherwise the parameters present in Table 2 were used. The experiment will be conducted by, at every trial, starting the agent at a random position in the environment. Naturally, starting inside a wall is not possible. Reaching the goal would give the agent a reward of 1000, hitting an obstacle would return  $-20$  and any other action would return  $-10$ . Additionally, agents can not move more than 1.0 in any direction. The collision system is simple, if an agent tries to move inside a wall, the system detects the infraction, sets the agent in the previous position and returns the reward. In other words, an agent constantly hitting the wall will not move at all, making the simple collision system even harder than a real system. However, an agent that hits the limits of a maze will have its final position limited by the environment. Therefore, it is possible to move sideways when hitting the limit of the environment. All results plotted are an average over 20 trials.

Figures 3 and 4 show respectively the performance and behavior of SSOC2 on a big continuous input-continuous output maze for four variations of the discount factor. This maze is very complex (both because of its size and form) therefore it is not known of other LCS algorithms which can solve this problem. Even though the performance does not change

so abruptly. Notice that the reason of the decrease in the performance can be understood by observing the behavior of the agent on the maze. The behavior of places more distant of the objective start to have poor behavior as the distant factor decreases. This is easily understandable when the Q-learning based function is taken into account. Because the discount factor means how exponentially fast a function value decreases. Lastly, the 0.999 may arrive at a good result, but the learning time makes it not specially useful. This happens also as a derivation of the reinforcement function, but here the discount factor make state-action values too close to each other, creating plateaus which confuse the algorithm.

A similar result is shown in Figures 5 and 6. This time the maze is smaller and therefore the decrease in performance is interestingly small, demonstrating that the algorithm is not sensitive to changes in the discount factor.

The discount factor is a SSOC2’s parameter because it is a consequence from choosing a Q-learning based fitness function. Therefore, this designing choice adds one parameter which has a complicated trade-off: high values make samples more similar to each other and thus make it difficult to evaluate which state is better, low values make the fitness decrease too fast and therefore multi-step problems which require many steps may have a poor fitness spreading (the fitness will decay to zero before the end of steps). Thus, although SSOC2 can still work and give near optimal performances for a given range of discount factor values, the sensitivity will still scale exponentially as the problem becomes harder (see the differences in performance for the big and small maze). Regarding this problem, two solutions are possible:

- Adaptive Discount Factor: The discount factor would be treated as another parameter to optimize and therefore would be changed through the evolution. In this case, since the parameter is directly related with the fitness, care should be taken to not allow some individuals to benefit from this fact. Possibly, the value of the discount factor should change from time to time and the average performance should be used as reference to decide if the next discount factor should decrease or increase in value.
- Use Another Fitness Function: The Q-learning based function is just one type of fitness function possible for reinforcement learning. It is certainly the standard fitness function, but a simple sum of rewards also work, provided that the algorithm is informed when the trial finishes.

In Figure 7, experiments evaluate the influence of granularity, i.e., the importance of dividing the input into finer pieces is evaluated. It is important to notice that the total population size (SOM size multiplied by the subpopulation size inside each cell) was kept constant. A SOM with size  $5 \times 5$  is just a quarter of the original size used in all the previous tests ( $10 \times 10$ ) and did show a similar performance and behavior. Only a small decrease in performance is observable. By decreasing the SOM size to  $2 \times 2$ , it seems to render the algorithm completely unable to solve the problem. This demonstrates the importance of some granularity. However, the results here were drawn with the simplest possible classifiers, i.e., an array representing the output to be given independent of the input. If more complex classifiers were used, possibly, a lower granularity could be used.

Table 2: Parameters

Differential Evolution	CR F	0.2 $random(0, 1)$
Self Organizing Map	Matrix Size Weight's initial value Neighborhood function Cell update threshold	$10 \times 10$ $random(0, 1)$ $\exp(-chebyshevDistance())^2$ 0.005
Self Organizing Classifiers	$\eta$ $\beta$ $\nu$ $\iota$ $\gamma$ $InitialFitness$	0.2 2 5 20 0.90 0

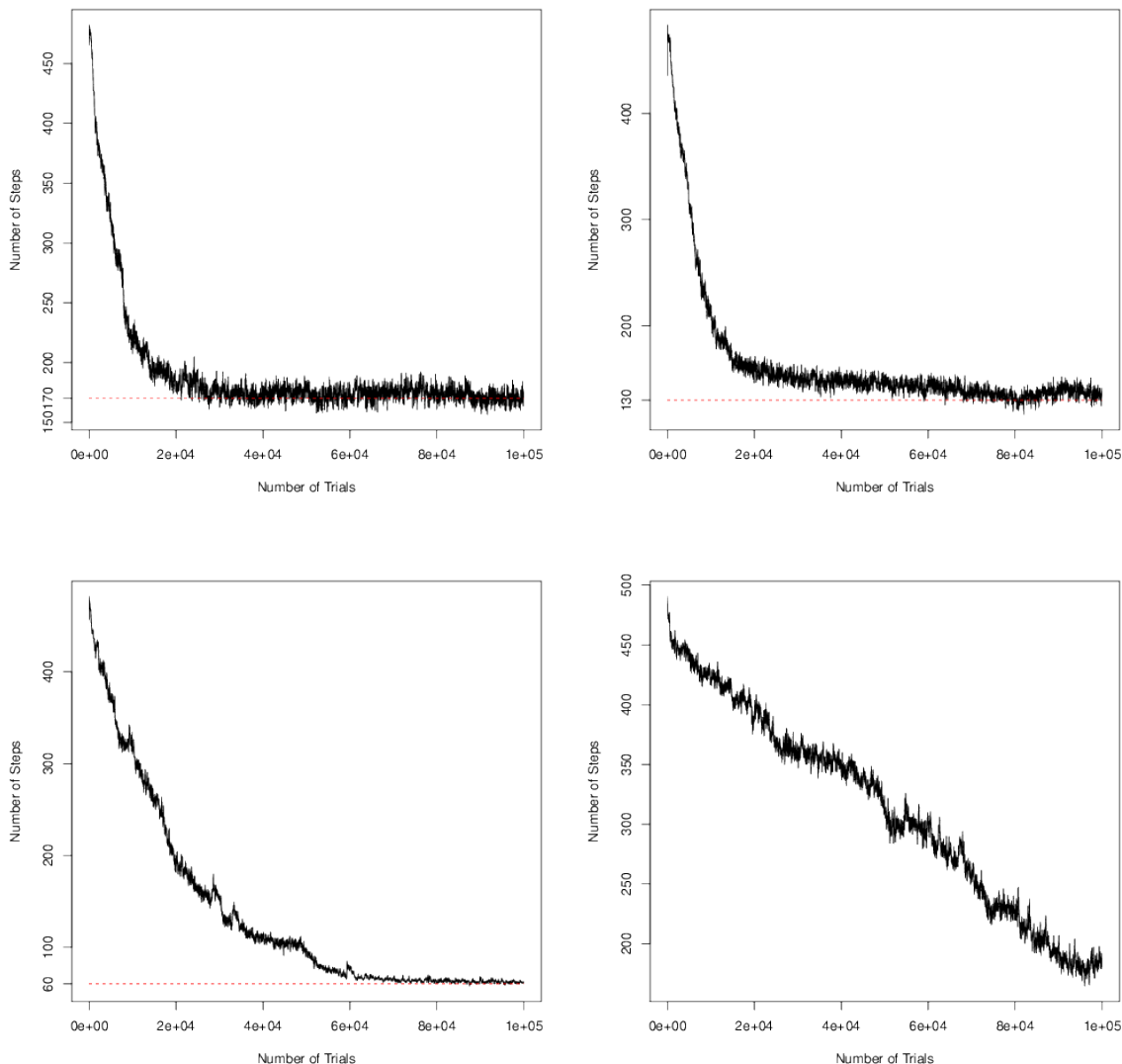


Fig. 3: Performance of the SSOC2 with four different discount factors: 0.8 (upper left), 0.9 (upper right), 0.99 (lower left), 0.999 (lower right). A SOM of size  $20 \times 20$  was used. The dashed red line is used for reference.

accuracy (although some degree of granularity will always help, decreasing the hypothesis' search space), because classifiers that are a little more complex usually built their output in relation to the input and therefore need less granularity to work. Lastly, increasing the SOM to  $20 \times 20$  achieves the same final performance and behavior of the original result (see Figures 5 and 6), though more learning time is needed by this increase in granularity.

## 4 Conclusions

This article presented tests to verify the sensitivity of SSOC2 as well as analyzed the effect of granularity in it. SSOC2 was shown not to be sensitive to changes in the discount factor, keeping similar performance for close values. However, the sensitivity seems to get worse with the increase of the problem's complexity. Two strategies to deal with this problem was proposed. One of it is to use an adaptive discount factor and the other is to use another fitness function.

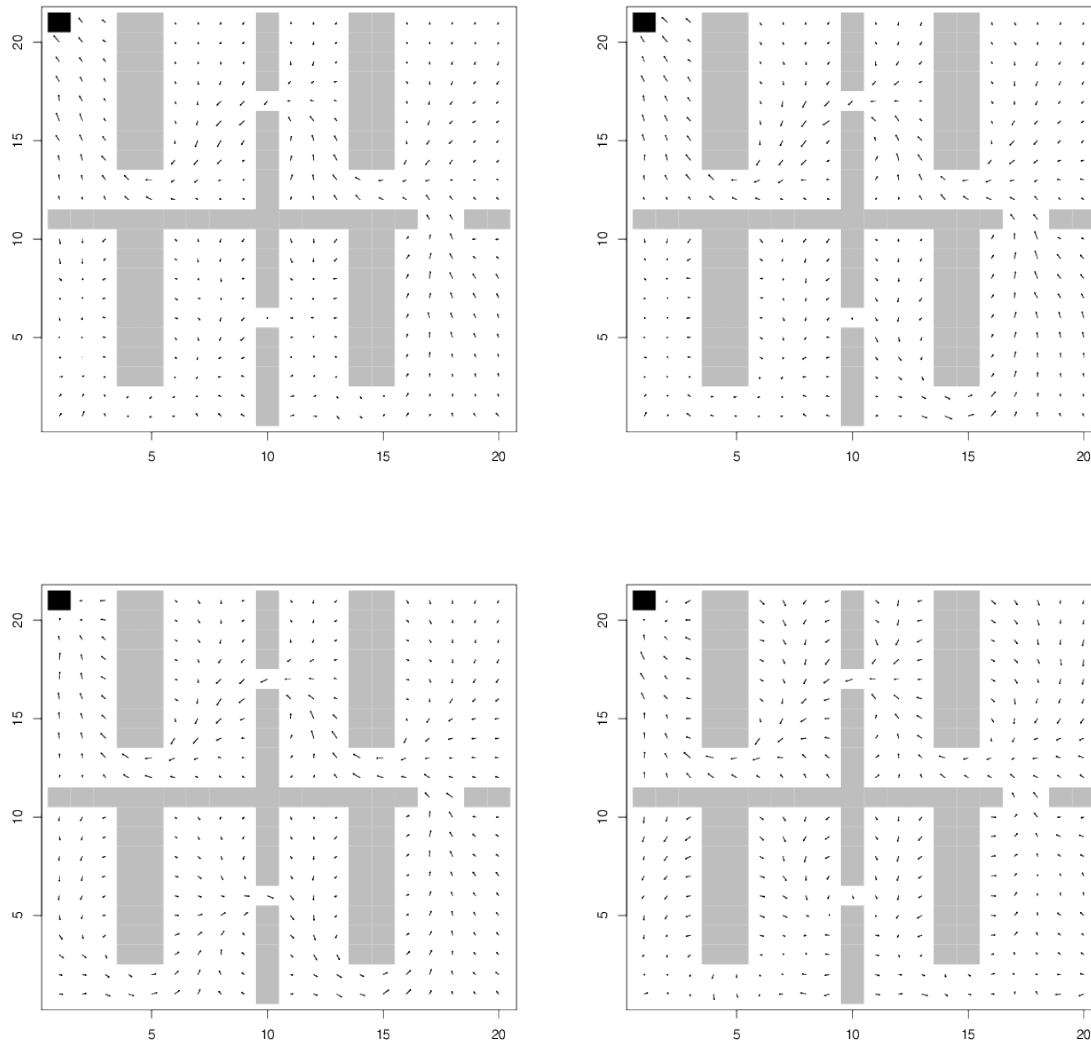


Fig. 4: Behavior of the SSOC2 with four different discount factors: 0.8 (upper left), 0.9 (upper right), 0.99 (lower left), 0.999 (lower right). The black square is the objective and the gray squares are the walls (a SOM of size 20x20 was used).

Moreover, when analyzing the granularity, a higher granularity was demonstrated to relate with higher accuracy but to cause a higher learning time. On the other hand, with less granularity the accuracy may decrease, depending on how much is decreased.

## 5 Acknowledgment

This work was supported in part by JSPS KAKENHI Grant Number 24560499.

- 1) E. Berglund and J. Sitte. The parameterless self-organizing map algorithm. *Neural Networks, IEEE Transactions on*, 17(2):305–316, 2006.
- 2) P. Lanzi, D. Loiacono, S. Wilson, and D. Goldberg. XCS with computed prediction in multistep environments. In *Proceedings of the 2005 conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 1859–1866. ACM, 2005.
- 3) P. Lanzi and R. Riolo. A roadmap to the last decade of learning classifier system research (from 1989 to 1999). *Learning Classifier Systems*, pages 33–61, 2000.
- 4) R. Storn and K. Price. Differential evolution—a simple and efficient heuristic for global optimization over continuous spaces. *Journal of global optimization*, 11(4):341–359, 1997.
- 5) K. Tamee, L. Bull, and O. Pinngern. Towards clustering with xcs. In *Proceedings of the 9th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 1854–1860. ACM, 2007.
- 6) R. Urbanowicz and J. Moore. Learning classifier systems: a complete introduction, review, and roadmap. *Journal of Artificial Evolution and Applications*, 2009:1, 2009.
- 7) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Self organizing classifiers and niched fitness. In *Proceeding of the fifteenth annual conference on Genetic and evolutionary computation conference*, pages 1109–1116. ACM, 2013.
- 8) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Self organizing classifiers: first steps in structured evolutionary machine learning. *Evolutionary Intelligence*, 6(2):57–72, 2013.
- 9) B. Widrow and M. E. Hoff. Adaptive Switching Circuits. In *1960 IRE WESCON Convention Record, Part 4*, pages 96–104, New York, 1960. IRE.

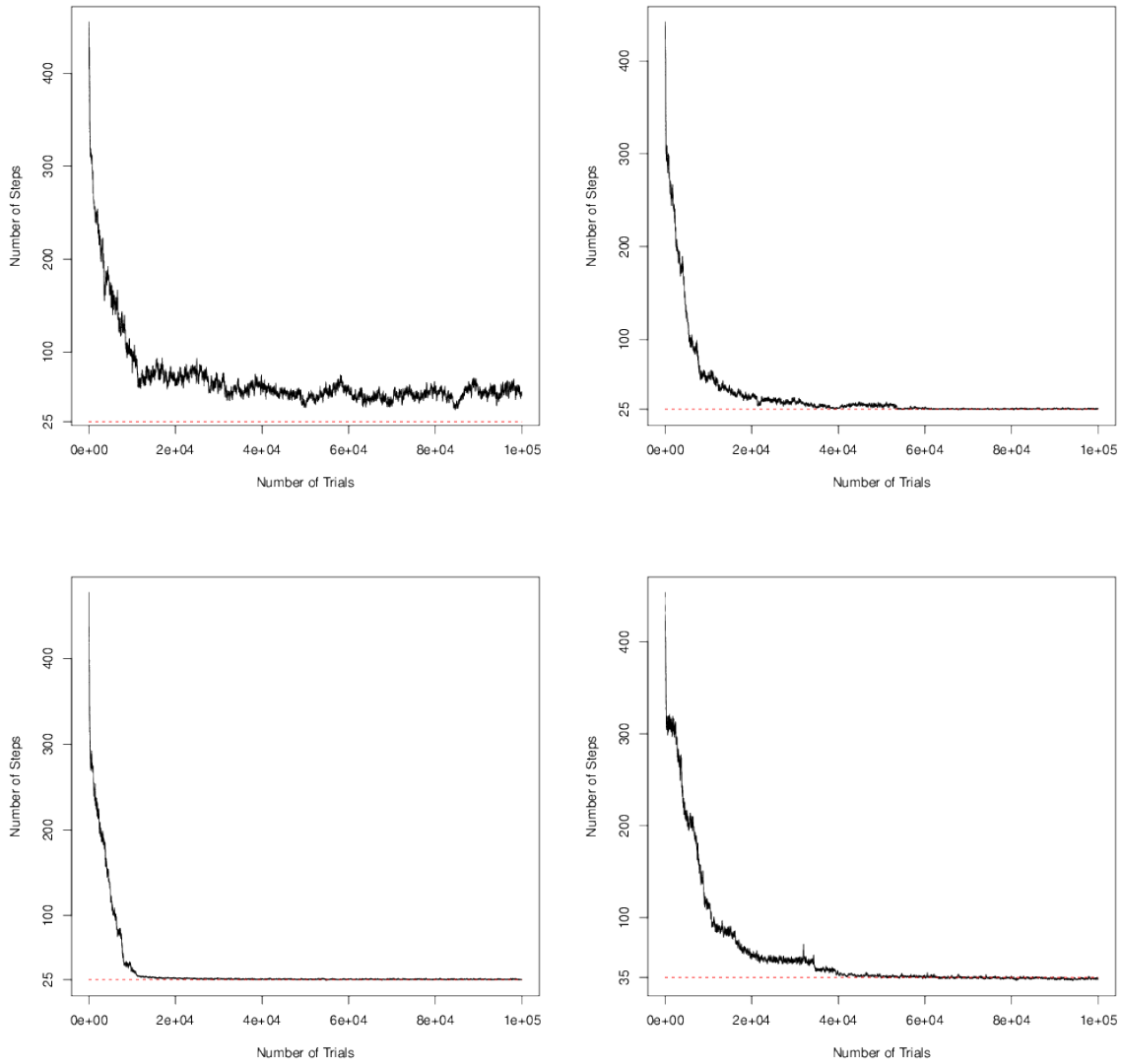


Fig. 5: Performance of the SSOC2 with four different discount factors: 0.7 (upper left), 0.8 (upper right), 0.9 (lower left), 0.99 (lower right). The dashed red line is used for reference.

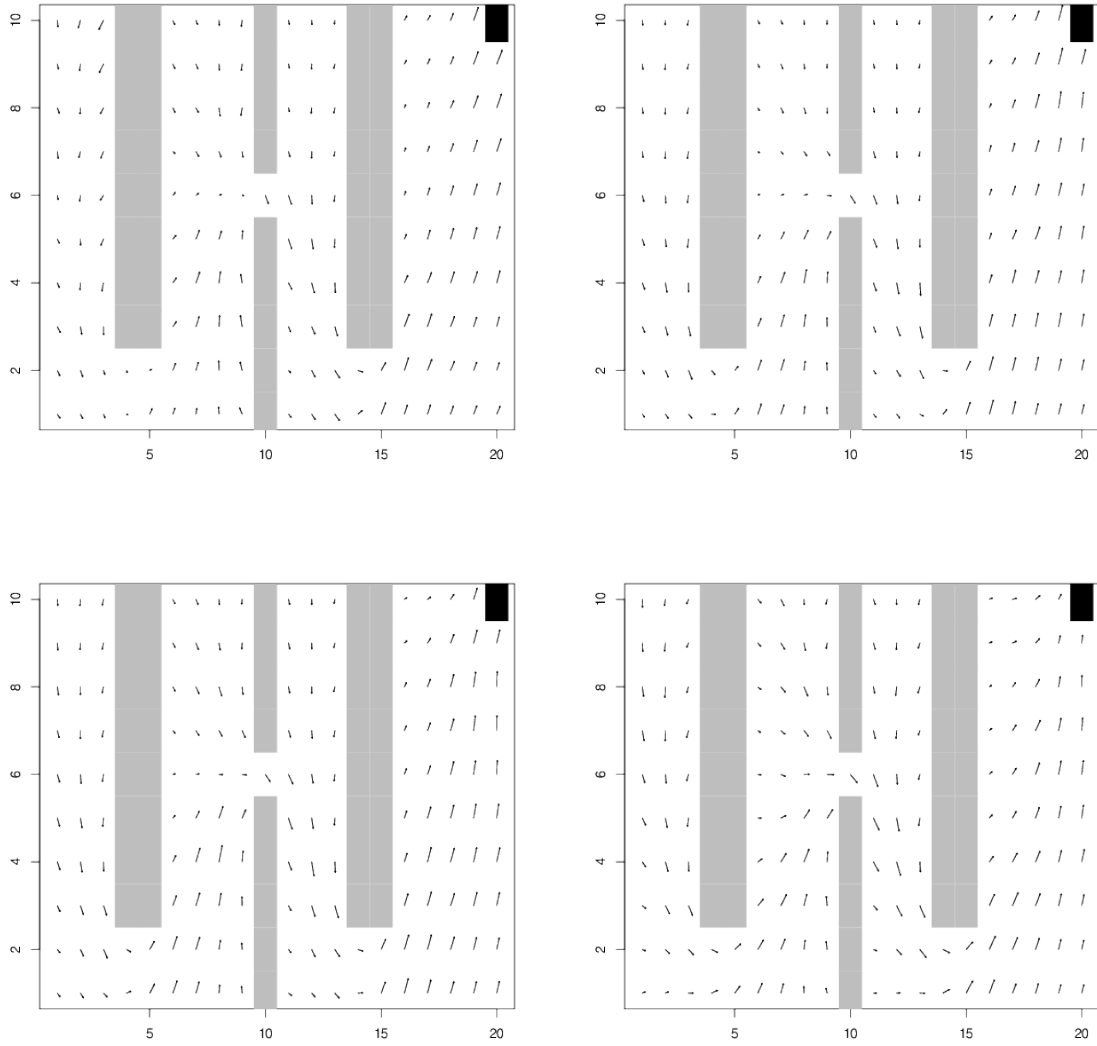


Fig. 6: Behavior of the SSOC2 with four different discount factors: 0.7 (upper left), 0.8 (upper right), 0.9 (lower left), 0.99 (lower right). The black square is the objective and the gray squares are the walls.

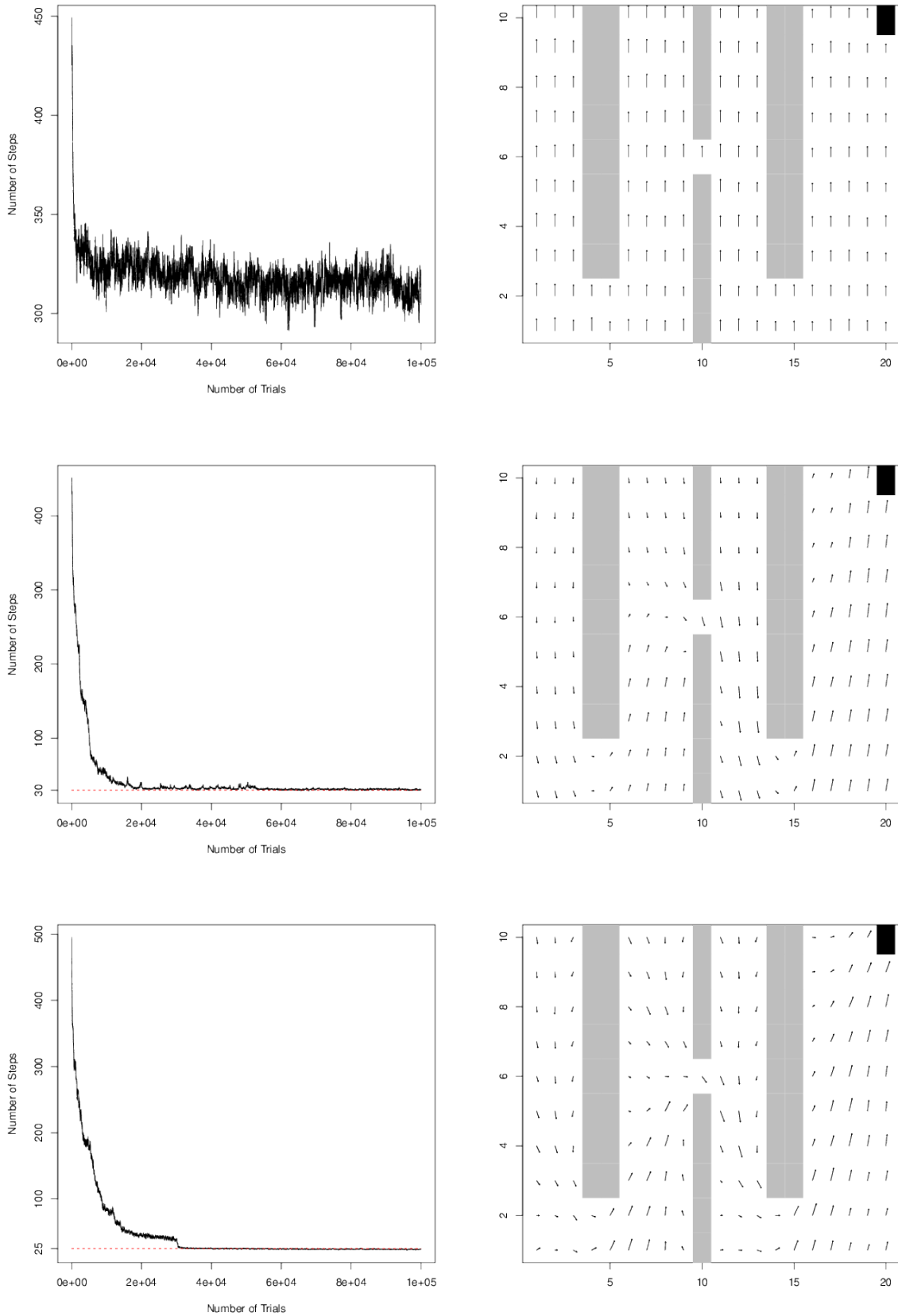


Fig. 7: The performance and behavior of SSOC2 are shown respectively on the left and right columns. In this experiment the total population size is kept the same, but the granularity and size of the population inside a cell is changed. In the first row a SOM population of size  $2 \times 2$  is used with  $(\beta = 200, \nu = 500)$ , in the second row a SOM size of  $5 \times 5$  with  $(\beta = 32, \nu = 80)$  is used, while the third uses a SOM of size  $20 \times 20$  with  $(\beta = 2, \nu = 5)$ . The dashed red line is used for reference.



# 判別分析の新世界

○ 新村秀一 (成蹊大学)

## New World of Discriminant Analysis

\* S. Shinmura (Seikei Univ.)

**Abstract**— Discrimination of two classes or objects is essential knowledge and technology for the science, technology and industry. Fisher proposed Fisher's linear discriminant function. After Fisher, logistic regression and Support Vector Machine (SVM) are proposed. But, there are three serious problems. These problems are resolved by Revised IP-OLDF, generalization ability of which is proofed by 100-fold cross validation.

**Key Words:** LDF, logistic regression, SVM, Revised IP-OLDF, k-fold cross validation. Generalization ability.

### 1 はじめに

異なった対象を正しく分けることは、科学技術と産業の基本である。Fisher<sup>4)</sup>は、異なる2群に属する対象が計測値で表される場合、2群の分散比最大化基準でFisherの線形判別関数(LDF)を提案した。その後、「Fisherの仮説」を考へることで2群を表す正規分布をプラグイン規則で $\log(N(\mathbf{x}; m_1, \Sigma) / N(\mathbf{x}; m_2, \Sigma)) = 0$ を計算することで同じLDFが分散共分散行列を用いて明確に定義できることが分かった。そして、2群の分散が等しくない場合( $\Sigma_1 \neq \Sigma_2$ )に2次判別関数(QDF)や、分散共分散行列で定式化できるマハラノビスの汎距離を用いた多群判別やMT(マハラノビス田口)理論<sup>37)</sup>が提案され、医学診断、パターン認識、各種格付け等に利用されてきた。最近では少ないケースから多くの変数を持つ分散共分散行列を推定しゲノム判別にも応用されている。筆者が日本にSASを紹介した際に、Goodnight社長<sup>7)</sup>の掃きだし法による変数選択法とそれに関する統計量に関するもの、JMPの開発者であるSaII副社長による「SASによる回帰分析」<sup>12)</sup>と一般化逆行列に関する3編の技術レポートに感銘を受けた。

筆者は1978年に大学卒業後すぐに、大阪府立成人病センターとNECとの心電図自動診断解析システムの開発プロジェクトに参加した。そしてプロジェクトリーダーの野村循環器医長から、3000件程度の32個の心電図の異常所見と正常所見のデータを渡され診断論理の研究テーマが与えられ<sup>33)</sup>。しかし、当時注目されていた計量診断学の中の判別分析で4年間研究したが、野村医師の経験的な枝分かれ論理にかなわなかった。その時「科学的判別分析が枝分かれ論理にかなわないことに衝撃を受けた」。そして4年間の総括として、医学診断がFisherの考へた判別分析では対応できないことを示す「地球モデル」を考へ、数年後にオペレーションズ・リサーチ誌<sup>20)</sup>に発表した。その後、異常群を正常群と判別する方法としてBayes診断を用いて、ある計測値が正常群から異常群に連続的に大きく(あるいは小さく)なるにつれて異常の確率が0から1に近づく診断法を「スペクトル診断」と名づけて発表した<sup>17)</sup>。その後、米国のFramingham研究という疫学研究でロジスティック回帰が開発され、スペクトル診断がよりスマートに実現されることが分かった。今日、医学診断ではロジスティック回帰が用いられ、各種格付けでもロジスティック回帰を用いている。

一方、数理計画法は関数の最大/最小問題を扱う学問である。例えば重回帰分析の最小二乗法は2次計画法

(QP)でLAV(Least Absolute Value)回帰は線形計画法(LP)で定式化できる。その延長線上で判別分析は、誤分類されるケースの例えば判別超平面からの距離の和を最小化するL1ノルム判別関数やLpノルム判別関数が研究されてきた。しかしStam<sup>16)</sup>が指摘したように統計ユーザーに利用されなかった。その理由は、SVMがその有用性を示すために多くの実証研究を行ってきたことと対比すれば理解できる。

しかしこれらの判別関数は以下の重大な問題を抱えている。1)判別超平面上のケースをclass1/class2のいずれに判別するかは決定不能であるにもかかわらず、多くの研究論文はclass1に含めてきた。多くの統計研究家は「統計は確率現象を扱う学問であり、判別超平面上のケースは乱数で割り振る」という理解で納得している。しかしこの説明は、判別超平面の近辺に多くの異常群がきてその診断に注力する医師には受け入れがたいし、統計ソフトでは乱数で決めず、単に論文にならってclass1に等号を含めている。しかし本来は $|f(\mathbf{x}_i)| \leq 10^{-6}$ で0判定している場合、その個数'm'を出力するしか対応策はないように考へる。2)H-SVMは2つのSV間にケースが来ないことで線形分離可能を明確に定義した。しかしH-SVMは線形分離可能でないデータに適用できないために良い線形分離可能な研究用データがないので、「線形分離可能なデータの判別の問題点の研究」が少なかった。既存の判別関数は理論的に線形分離可能なデータを認識できない。特にFisherのLDFとQDFは判別成績が悪い。3)分散共分散行列に基づくLDFとQDFは変数が一定値を取る場合に、分散共分散行列の逆行列が計算できない問題がある。多くの統計ソフトはこれらの変数を判別分析の計算から事前に省いている。これは3つに分けて考へる必要がある。2群のある変数が同じ一定値を取る場合は判別に有効でないので省いても影響はない。2群の変数値が異なった一定値を取る場合、これらは判別に有効であるので省くのは間違いである。そして一方の群の変数値のみが一定値で他方の群がバラツク場合である。JMPは一般化逆行列の技術を採用しているため、1と2の場合には問題が起こらない。しかし、試験の合否判定で例えば合格水準を90%にとると、合格群の学生がある設問を全員正解することもある。この時、QDFの一般化逆行列は対応できず、class2をclass1に誤判別する問題が分かった<sup>34)</sup>。2012年の11月にこの問題の原因が分かりJMPに報告したが、いまだに解決されていない。解決策としては、一定値を取る変数に小さなノイズを加えるだけで解決できる。しかし、一定値を取り分散が0になる場合、この対応で十分かどうか

の検証が必要である。例えば、「2群の平均の差のt検定」で共通の分散の計算が必要であるし、変数選択法などの見直しも考える必要がある。以上の問題は **MNM基準による改定 IP-OLDF** で解決できた。

本研究では100重交差検証法で、2章で取り上げる線形判別関数を比較し、検証標本で得られた平均誤分類確率で汎化能力の検証と、判別係数の95%信頼区間を比較検証する。

## 2 比較する線形判別関数

### 2.1 統計的線形判別関数

Fisher は判別される2群の分散比の最大化から式(1)に示すLDFを提案した。これは制約式なしの非線形計画法(Non Linear Programming, NLP)になる。

$$\text{MIN} = \mathbf{b}^t (\mathbf{x}_{m1} - \mathbf{x}_{m2}) (\mathbf{x}_{m1} - \mathbf{x}_{m2})^t \mathbf{b} / \mathbf{b}^t \Sigma \mathbf{b}; \quad (1)$$

ただし、 $\mathbf{m}_1$  と  $\mathbf{m}_2$  は群1と群2の平均。

$\Sigma$  はプールした分散共分散行列、 $\mathbf{b}$  は判別係数。

その後、2群が「Fisherの仮説」を満たせば式(1)で得られるLDFが、容易に2群を表す正規分布関数の対数尤度比から式(2)のように明示的に定式化されることが分かった。これが統計ソフトに取り入れられ分散共分散行列による判別関数が広く普及したと考えられる。

$$\text{LDF} : f(\mathbf{x}) = \{ \mathbf{x} - (\mathbf{m}_1 + \mathbf{m}_2) / 2 \}^t \Sigma^{-1} (\mathbf{m}_1 - \mathbf{m}_2) \quad (2)$$

現実のデータは分散共分散が等しいことは少ないので、2群の分散共分散行列が等しくない場合は式(3)のQDFが明示的に定式化される。

$$\text{QDF} : f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^t (\Sigma_2^{-1} - \Sigma_1^{-1}) \mathbf{x} / 2 + (\mathbf{m}_1^t \Sigma_1^{-1} - \mathbf{m}_2^t \Sigma_2^{-1}) \mathbf{x} + c \quad (3)$$

また式(4)のマハラノビスの汎距離を用いて多群判別や品質管理のMT理論<sup>37)</sup>が考えられた。

$$D = \text{SQRT} ((\mathbf{x} - \mathbf{m})^t \Sigma^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{m})) \quad (4)$$

式(2)から式(4)のように分散共分散行列の逆行列を計算するだけでLDFやQDFや多群判別や1クラス判別分析が定式化され、数理計画法を用いた式(1)よりも統計ソフトとして実現しやすく、理論展開しやすいことは一目瞭然である。しかし分散共分散行列の逆行列を計算する必要があり、ある説明変数が一定値をとる場合はランク落ちして判別関数が求まらない問題がある。またこれらの判別関数はMNM=0のデータを認識できないこともすでに分かっている<sup>32)34)</sup>。

これに対してpを基準と考える群に属する確率と考え、オッズ比の対数  $\log(p/(1-p))$  が説明変数の線形回帰式で表されると考えて式(5)のロジスティック回帰が提案された。一般的にLDFやQDFよりロジスティック回帰の誤分類数(Number of misclassifications, NM)が少ないことが経験的に知られている。これは判別される2群のデータに合わせて最尤推定法でロジスティック回帰を求めているからと考えられる。また、ある計測値が一方向的に大きくなる(あるいは小さくなる)と確率は0から1まで大きくなるので、医

学診断などで正常群から離れていくほど異常群に属する確率が1まで高まっていくという常識に合致する。またFirth<sup>3)</sup>は、収束計算が不安定になるとNMが0になることを指摘している。しかし、新村は一部の例外でロジスティック回帰はMNM=0のデータを認識できないことを報告している<sup>32)</sup>。これは判別超平面上にケースが来た場合、改定IP-OLDF以外の判別関数はそれを正しくいずれの群に判別するかができない**判別分析の未解決問題**のためである。

$$\text{Log}(p/(1-p)) = f(\mathbf{x}) \quad (5)$$

### 2.2 数理計画法による線形判別関数

数理計画法は、制約条件のあるなしにかかわらず、**関数の最大/最小値問題を扱う学問である**<sup>27)31)</sup>。このため、重回帰分析や判別分析を数理計画法で定式化する研究が行われてきた。しかし重回帰分析は最小二乗法がQPで、絶対値の和の最小化モデルがLPで定式化されるが<sup>14)</sup>、判別分析ほど多くの研究は行われていない。憶測の域を出ないが、重回帰分析では推測統計学的な知見が得られるので数理計画法による研究は不利であるのに対して、判別分析はクラスター分析に近い記述的な手法であり有利と考えられたためであろう。

Stam<sup>16)</sup>は、数理計画法による判別関数の総括論文(5.1 Why have statisticians rarely used Lp-norm methods?)で、これらの研究成果が統計ユーザーに使われていないことを指摘しその理由を分析している。彼の分析は大学の同僚の統計研究者との議論の集約であると述べているが、間違いではないが本質的でないとする。数理計画法による判別分析の研究は、Fisherなどの統計分野で確立された手法の後追いの研究であり、それらと比較して判別結果が優れていることと新見識がなかったためとする。

Stamと相前後してVapnik<sup>38)</sup>はSVMを提案し、今日でも広く使われている。その理由は、種々の実証研究で成果を出していること、式(6)のハード・マージン最大化SVM(H-SVM)から式(7)のソフト・マージン最大化SVM(S-SVM)、そしてKernel SVMと異なった視点で魅力的なモデルを展開し、汎化能力(Generalization Ability)<sup>1)8)</sup>という統計ユーザーの要求に合う提案をしている。多くの研究者はKernel SVMに注目しているが、筆者はH-SVMで判別分析を線形分離可能なデータ(MNM=0と同義)の判別を判別分析の出発点とした点が重要と考えている。

$$\text{MIN} = \| \mathbf{b} \|^2 / 2; \quad y_i * (\mathbf{x}_i^t \mathbf{b} + b_0) > 1; \quad (6)$$

$$y_i = 1 / -1 \in \text{class1} / \text{class2}$$

しかし現実のデータはMNM=0であることは稀であるので、式(7)のように幾つかのケースがSVの反対側にくる事を認めてその距離の和( $\sum e_i$ )を最小化するのがS-SVMである。目的関数でマージン最大化と $\sum e_i$ の最

小化という2つの異なった最適化基準をペナルティ  $c$  と呼ぶ重みで単目的化している。同じ構造を持つポートフォリオ分析<sup>36)</sup>は、分散共分散で定義されるリスクは目的変数に、利益を制約に組み込んで1目的最適化で定式化している。SVMの問題は、H-SVMはMNM=0のデータ以外に適用できず、S-SVMは理論的にMNM=0の判別の保証がないためにMNM=0のデータを見つけることが難しかったために、MNM=0の判別分析の研究が進まなかった点である。

$$\text{MIN} = \|b\|^2 / c \sum e_i; \quad y_i * (x_i' b + b_0) \geq 1 - e_i; \quad (7)$$

### 2.3 最適線形判別関数 (OLDF)<sup>28)30)</sup>

三宅と新村<sup>11)</sup>は、Warmack & Gonzalez<sup>39)</sup>の論文に触発され、最小誤分類数 (Minimum Number of Misclassifications, MNM) に基づく最適線形判別関数 (Optimal Linear Discriminant Function, OLFDF) を提案した。しかし、ヒューリスティック手法のため、研究を進展させることができなかった。筆者は統計ソフトのSAS<sup>12)</sup>と数理計画ソフトのLINDOやLINGO<sup>14,15)</sup>を日本に紹介し、大学や企業に普及を図るとともに研究を行ってきた。そこでIPを用いて学習標本で最小のNM (MNM) を直接求めるIP-OLDF<sup>21)22)23)</sup>を考えて新しい幾つかの判別分析の知見が得られた。しかし、データが一般位置にない場合に正しいMNMを求めないことが分かりMNMを求める改定IP-OLDFを開発した<sup>25)26)</sup>。

判別規則は、 $y_i f(x_i) > 0$  であれば  $x_i$  を class1/class2 に正しく判別し、 $y_i f(x_i) < 0$  であれば誤判別するので判別係数を定数倍しても変わらない。そこで  $f(x) = b_0 + b_1 x_1 + \dots + b_p x_p$  の定数項が  $b_0 \neq 0$  であれば、 $b_0$  で割っても判別規則は影響を受けず定数項を1に固定できるので式(8)のように定式化したものがIP-OLDFである。

$$\text{MIN} = \sum e_i; \quad y_i * (x_i' b + 1) \geq -e_i; \quad (8)$$

定数項を1に固定したことで、式(8)は  $p$  次元の判別係数の空間で定式化される。 $n$  個のケースで作られた制約式を等号制約にした  $n$  個の線形超平面を考える。各線形超平面  $H_i (y_i * f(b) = 0)$  は、 $p$  次元の判別係数の空間を  $y_i * f(b) > 0$  の+半平面と  $y_i * f(b) < 0$  の-半平面に分割し、空間は有限個の凸体に分割される。各凸体の内点は、 $n$  個の半平面のうちの-半平面の側にある数がNMになるLDFに対応する。凸体の内点の誤分類数がMNMになる凸体を**最適凸体**と呼ぶ。IP-OLDFは少なくとも  $p$  個の制約式が等式制約に拘束される凸体の頂点を求める。 $e_i$  は0/1の整数変数であり  $y_i * f(b) \geq 0$  であれば  $e_i = 0$  で、 $y_i * f(b) < 0$  であれば  $e_i = 1$  として  $y_i * f(b) \geq -1$  という制約式が選択される。しかし判別超平面上にケース  $x_i$  がある場合、正しく判別されたと見なされる問題が発生する。目的関数はこの  $e_i$  の個数を最小化しているが、凸体の頂点や辺に対応した  $f(x_i) = 0$  になるケースは正しく判別されたものとして

扱うので**判別分析の未解決問題**が生じる。このためデータが一般位置にある場合(頂点が丁度  $p$  個の線形式の交点)は正しい最適凸体の頂点すなわちMNMを求めると、一般位置にない場合(頂点が  $(p+1)$  個以上の線形式の交点)は正しい最適凸体の頂点を求めないことがあることが分かった。また  $y_i = 1/-1$  と class1 / class2 の組み合わせは事前に人間が決めることができずデータが決めるので、実際は定数項を1と0と-1の3種類で計算する必要がある。パターン認識の研究では定数項を1に固定しないので、定数項を含む  $(p+1)$  次元の空間で考えている<sup>8)</sup>。この場合は  $n$  個の線形超平面はすべて原点で交差し、判別係数とNMの関係が明確でなくなる。その意味でIP-OLDFは実際には利用できないが、次の3つの判別分析の新知見が分かった。1) 線形判別係数とNMの関係が明らかになる。2) 最適線形判別関数は最適凸体の内点を選ばばよく、この場合**判別分析の未解決問題**が解決できる。3) MNMには単調減少性があるので  $\text{MNM}_q = 0$  であれば  $\text{MNM}_{(q+1)} = 0$  になる。そこで最適凸体の内点を直接求める式(9)の**改定IP-OLDF**を定式化した。 $b_0$  はLDFの定数項で自由変数である。右側の定数項に1を加えて判別超平面の代わりにSVで判別することにした。MはBigM定数と呼ぶ大きな正の整数値であり、 $y_i f(x_i) \geq 1$  であればケース  $x_i$  は  $e_i = 0$  としてSVで正しく判別され、SVで判別されない  $x_i$  は  $e_i = 1$  として  $y_i f(x_i) \geq 1 - M$  という制約式を選ぶ。目的関数はSVで判別されないケース数の和 ( $\sum e_i$ ) を最小化しているため、 $|y_i * f(x_i)| < 1$  になるケースがない場合のみMNMに等しくなる。M=10000のような大きな正の値を用いれば、SVで判別されない全てのケースは  $y_i f(x_i) = -9999$  というSVの代わりになる超平面に引きずられるので  $|y_i * f(x_i)| < 1$  の範囲にケースがこないことを期待している。この場合は、 $f(x) \neq 0$  になるケースはないので、IP-OLDFの定義した最適凸体の内点に対応していることが分かる。

$$\text{MIN} = \sum e_i; \quad y_i * (x_i' b + b_0) \geq 1 - M * e_i; \quad (9)$$

$e_i$  を非負の実数にしたものが改定LP-OLDFであり、LPで定式化でき計算速度が速い。式(7)で  $c$  を大きくしたS-SVMとほぼ似た結果になる。 $y_i f(x_i) \geq 1$  であればケース  $x_i$  はSVで正しく判別されるが、それ以外は  $y_i f(x_i) < 1$  であるために  $e_i = 1/M$  であれば  $f(x_i) = 0$  になる。数理計画法を用いた判別関数は、不等式制約の幾つかの制約式を等式制約に固定することで解が求まるので、

「**判別分析の未解決問題**」を回避できない。MNMはLDFの誤分類数の下限値になるのでそれよりNMが小さいとこの問題が生じていることが分かる。しかしこの問題は、 $f(x_i) = 0$  になるケース数を直接調べればすむ話である。もし  $m (> 0)$  個あれば、少なくとも従来の判別関数のNMはこの値だけ増える可能性がある。

しかし改定IP-OLDFは計算時間がかかる。そこで第1段階で改定LP-OLDFで全ケースを分析し、SVで正し

く判別されるケースを  $e_i = 0$  に固定する. 第 2 段階で固定されなかったケースだけで改定 IP-OLDF を適用する. これによって MNM の近似値を高速で求める改定 IPLP-OLDF を開発した<sup>29)35)</sup>.

### 3 判別分析の新知見と 3 つの問題

IP-OLDF で判別分析の新しい知見が分かった. しかし正しい MNM を求めないことがあることが分かったので, 改定 IP-OLDF を開発した. そして 3 つの問題に正しく対応できる唯一の LDF であることが分かった.

#### 3.1 判別分析の新知見

今, 2 個の説明変数で次の 3 ケースを 2 群判別することにすれば, IP-OLDF は式(10)のようになる.

$$\begin{aligned} \text{class1: } \mathbf{z}_1 &= (-1/18, -1/12), \\ \text{class2: } \mathbf{z}_2 &= (-1, 1/2), \quad \mathbf{z}_3 = (1/9, -1/3) \end{aligned}$$

$$\text{MAX} = \sum e_i;$$

$$\begin{aligned} \{- (1/18) * b_1 - (1/12) * b_2 + 1\} &\geq -e_1; \\ -\{-b_1 + (1/2) * b_2 + 1\} &\geq -e_2; \\ -\{(1/9) * b_1 - (1/3) * b_2 + 1\} &\geq -e_3; \quad \dots \quad (10) \end{aligned}$$

そして制約式から式(11)の 3 個の線形式を考える. 各線形式は, Fig. 1 に示すとおり判別係数  $(b_1, b_2)$  の空間を  $y_i f(\mathbf{x}_i) > 0$  とする「+半平面」と  $y_i f(\mathbf{x}_i) < 0$  とする「-半平面」に分割し 7 個の凸体になる. データ空間でケース  $\mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \mathbf{z}_3$  は点になり, 判別係数の空間では直線 H1, H2, H3 に対応する. 一方, 判別係数の空間の任意の点  $(b_1, b_2)$  はデータ空間で線形判別関数  $f(\mathbf{x}) = b_1 * x_1 + b_2 * x_2 + 1$  になる.

$$\begin{aligned} H1 : - (1/18) * b_1 - (1/12) * b_2 + 1 &= 0, \\ H2 : -b_1 + (1/2) * b_2 + 1 &= 0, \\ H3 : (1/9) * b_1 - (1/3) * b_2 + 1 &= 0 \quad \dots \quad (11) \end{aligned}$$

各凸体の内点を判別関数として選べば, 誤分類数は  $n$  個の線形式の「-半平面」にある個数と等しくなる. すなわち各凸体の内点には, NM が一意に対応し, 「-半平面」に対応したケース  $\mathbf{x}_i$  を誤判別し, 「+半平面」に対応したケース  $\mathbf{x}_i$  を正しく判別し, 判別超平面上にケースがくることはない. 凸体は有限個のため, 必ず NM が最小のものがあつて, この凸体を「最適凸体」と呼ぶことにする. また各凸体の内点に対応した判別関数は, 判別超平面上にケースがないので, 「判別分析の問題 1」が解決できる. すなわち, 凸体の内点以外の頂点や辺に対応した判別関数が, この問題に対応できないことになる.  $q$  変数の IP-OLDF は  $q$  個以上のケースを判別超平面上に固定する. データが一般位置にある場合は丁度  $q$  個のケースで固定され, 正しい最適凸体の頂点を求める. しかしデータが一般位置にない場合は  $(q+1)$  個以上のケースが固定される場合があり, 正しい最適凸体の頂点を求めないことがあることが分かった. また S-SVM や改定 LP-OLDF は SV で判別しているが,  $e_i$  が非負の実数のため判別超平面上にケースがくることを

避けることができない.

#### (1) 最適凸体

Fig. 1 の 2 次元の判別係数の空間は, 3 個のケースで 7 個の凸体に分割される. 内部に記した数字は誤分類数 NM で, 内点が 3 個の線形超平面の「-半平面」側にある個数に対応する. 図の三角形は  $NM=0$  で MNM になる. 内点の集合の誤分類数 NM が MNM になる凸体を最適凸体と呼ぶことにする. データが一般位置すなわち全ての凸体の頂点が  $q$  個の線形超平面で構成されている場合, 最適凸体は, それを構成する線形超平面の必ず「+半平面側」にある. もし「-半平面側」にあれば, その半平面の反対側にある凸体は「+半平面」側にあり, NM が 1 少なくなり最適凸体の定義に反することになる. この場合に限って IP-OLDF が最適凸体の頂点を求めることができるのは, この頂点を共有する凸体は  $2^q$  個あり  $q$  ビットの 0/1 の情報に変えて +/- に置き換えて考えれば, 一つの凸体のみ全てこの  $q$  個の線形超平面の+側にある. しかし,  $(q+1)$  個以上の線形超平面の凸体の頂点を求めた場合, この  $(q+1)$  個は class1/class2 のいずれかに判別するかは決定できないのに式(6)の目的関数で 0 すなわち正しく判別されたとみなす. 例えば,  $\mathbf{z}_1$  と同じ値を持つ 2 ケースが class2 に追加されると, H1 の下側にある 4 個の凸体の NM は 2 増えるが, H1 と H2 の交点の式(10)の目的関数の値は 0 のままである.

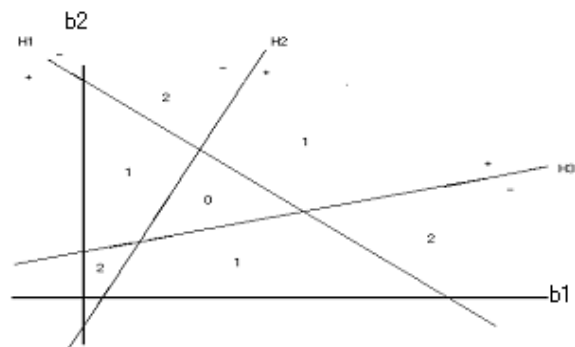


Fig.1 The optimal convex polyhedron and MNM

#### (2) MNM の単調減少性

今  $r$  個 ( $r+1 \leq q$ ) の説明変数の MNM を  $MNM_r$  とし, 用いられていない説明変数を 1 個追加した  $(r+1)$  個の MNM を  $MNM_{(r+1)}$  とすれば, 必ず  $MNM_r \geq MNM_{(r+1)}$  という「MNM の単調減少性」が得られる. これは  $r$  次元の説明変数の空間は  $(r+1)$  次元の説明変数の空間の部分空間であり,  $(r+1)$  次元の説明変数の空間には  $MNM_r$  になる凸体が含まれる. 銀行データ<sup>5)</sup>で, IP-OLDF は  $(X_4, X_6)$  で  $MNM=0$  になることが分かった. このため MNM の単調減少性からこの 2 変数を含む 16 個の判別関数で  $MNM=0$  になる. すなわち 6 個の説明変数から 63 個の異なった判別関数が得られるが, 16 個は  $MNM=0$  になり, 残り 47 個の MNM は 0 でない. これによって H-SVM が提起した  $MNM=0$  の判別から, 0 でない判別まで検討できる.  $MNM=0$  の判

別が重要なのは、判別手法の評価で誤分類確率が正のものを考える以前に、 $MNM=0$ であることを認識できるか否かの判別が重要であり、認識できない判別関数は医学診断やパターン認識等の現実の問題に適用することには問題がある。また  $MNM=0$  の判別結果は、比較が明確になる。

### (3) 定数項の役割

IP-OLDF では定数項を 1 に固定して考えることで、判別係数と NM の関係が分かった。しかし、定数項を 1 に固定した以外に、 $-1$  と  $0$  に固定した IP-OLDF を解く必要がある。これは、 $f(\mathbf{x}) > 0$  なら class1,  $f(\mathbf{x}) < 0$  なら class2 と我々が分析前に決定できず、データが決めるためである。式(8)の定数項を正の  $a_0 (> 0)$  に固定した場合は式(12)のように変形すれば良い。すなわち、定数項を正の  $a_0$  に固定した場合は、単に Fig. 1 の各座標軸の交点を  $a_0$  倍に相似変換すればよい。

$$f(\mathbf{x}) = a_1x_1 + a_2x_2 + \dots + a_qx_q + a_0 \\ = a_0 * (b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_qx_q + 1) \dots (12)$$

$a_0$  が 0 の場合、全ての線形超平面は原点を通る。パターン認識の研究では定数項を含む  $(q+1)$  次元で説明変数の空間を考えているが、この場合は全ての線形超平面は原点を通り判別係数と NM の関係を明確に考察できない。定数項が 0 の場合は、例えば  $x_q$  で  $q$  個の説明変数の値を割れば、 $q$  変数目の値は 1 になり  $(q-1)$  個の説明変数をもつ定数項 1 の判別と同じになると考えられる。実証分析で得られた NM は定数項を 1 と  $-1$  に固定したものより少なくなるものはなかった。次に、 $a_0$  を負にすれば定数項を 1 に固定した判別係数の空間と異なった、 $-1$  に固定した判別係数の別空間とその相似な空間になる。すなわち、判別係数と NM の関係は式(8)の定数項が 1 と  $-1$  と  $0$  の 3 つの異なった凸体で分割された  $q$  次元空間を考える必要がある。もし一般的な線形判別関数  $f(\mathbf{x})$  の判別スコアが 0 と判定されるケース  $\mathbf{x}_1$  がなければ、必ずどこかの凸体の内点に対応した判別関数になる。一方 0 になるケースがある場合、凸体の頂点あるいは辺に対応していることが分かる。

## 3.2 判別分析の 3 個の問題のまとめ

判別分析の問題 1 は、判別超平面上のケースが class1/class2 のいずれに判別されるかは決定不能であることが見過ごされてきたことである。IP-OLDF の研究で各凸体の内点に対応した判別関数を求めればこの問題が解決できることが分かった。また、合否判定を考えると大問 4 問の合計点が 50 点以上を合格とした場合、 $f=T1+T2+T3+T4=50$  という LDF は、 $f \geq 0$  であれば合格、 $f < 0$  であれば不合格と判別できる。この場合は、判別規則が説明変数で明確に記述できるので、 $f=0$  すなわち合計点が 50 点の学生は合格群に判別できる。第 2 の問題は、線形分離可能なデータを H-SVM と改定 IP-OLDF 以外は正しく認識できないことである。これは 4 章以降で詳しく検討する。第 3 の問題点は一方の

群のある変数が一定値を取り、他群がバラツク場合、一般化逆行列を採用している QDF に問題が起きる正則化判別分析<sup>6)</sup>でも起きたが筆者の指摘で 2 つのオプションをユーザーが指定する改良正則化判別分析が提供され改善された。現時点では QDF の代わりに改良正則化判別分析の利用が進められる。

## 3.3 小標本のための k-重交差検証法

近年、各種計測器や POS データあるいは Web 上から大量のデータが得られるようになった。しかし、医学診断をはじめ多くの研究では当初小標本のデータしか得られず、その研究結果を踏まえて数多くの研究の中から目的とする研究に収斂させていく必要がある。そのために小標本のために考えられた L00 法はこれまで多くの貢献をしてきた<sup>9)</sup>。しかし、Bootstrap 法<sup>2)</sup>を採用して小標本から大標本(疑似的な母集団)を生成すれば、それに K-重交差検証法が適用できる。これを用いて L00 法に代わるモデル決定や、複数の判別手法を個別の判別モデル毎に汎化能力の比較検討できる。さらに、学習標本と検証標本で得られた判別結果から判別係数や誤分類確率の 95%信頼区間の推定に利用できる<sup>31)</sup>。

分析したい小標本を用いて、次のような疑似的な母集団を作成し 100 重交差検証法を行う。

- 1) 分析したい小標本を JMP<sup>13)24)</sup>で class1/class2 別に 100 個コピーし、乱数値をもつ変数をつけ加える。そして昇順で並べ替えて、小標本と同じケース数をもつ 100 個の部分標本にわけて 1 から 100 の部分標本番号を与える。
- 2) 部分標本の 1 から 100 を学習標本とし、疑似母集団を検証標本として 100 重交差検証を行う。これによって、検証標本は疑似母集団、学習標本はそれからサンプリングされた標本と考えることができる。

## 4 合否判定による検証

MNM の単調減少性は、重要な研究テーマを示す。 $q$  個の説明変数で  $MNM=0$  であれば、その  $q$  個の説明変数を含む全ての判別関数の  $MNM$  は 0 になる。本研究では、筆者の統計入門の 2012 年の中間試験の合否判定を取り上げる。4 個の大問の得点を説明変数として合計得点で合否判定を行うと (T2, T4) の 2 問で  $MNM=0$  になった。15 個の判別関数のうち 4 個で  $MNM=0$  になり、これで汎化能力と 95%信頼区間を検討する。

### 4.1 2012 年の統計入門の中間試験

2010 年から成蹊大学経済学部 1 年生を対象に統計入門を教えている。そして中間試験と期末試験を 10 択 100 問の試験を行ってきた。実際の合否判定は得点分布の 10%を用いているが、研究のため 50%と 90% も検討した。小問 100 問の合否判定で、判別分析の問題 3 が見つかった。そして 100 問を 4 個の大問にまとめた 2012 年までの 18 個の合否判定で、LDF の誤分類確率の範囲が

[0.17, 0.23], QDF の誤分類確率の範囲が [0.01, 0.11] であることが分かった。また改定 IP-OLDF で Table1 の結果が得られた。2012 年の中間試験の 10%水準の合否判定は (T4, T2) の 2 間で MNM=0 になることが分かった。本研究では、この 2 間を含む 4 個の判別関数 (T1, T2, T3, T4), (T2, T3, T4), (T1, T2, T4), (T2, T4) で検討を行う。

Table1 Results of discrimination of midterm exams in 10% level.

Year	P	Var.	MNM	Logi.	LDF	QDF
2010	1	<b>T4</b>	6	9	11	11
	2	<b>T2</b>	2	6	11	9
	3	<b>T1</b>	1	3	8	5
	4	<b>T3</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>9</b>	<b>2</b>
2011	1	<b>T2</b>	9	17	15	15
	2	<b>T4</b>	4	9	11	9
	3	<b>T1</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>9</b>	<b>10</b>
	4	T3	0	0	9	11
2012	1	<b>T4</b>	4	8	14	12
	2	<b>T2</b>	<b>0</b>	<b>0</b>	<b>11</b>	<b>9</b>
	3	T1	0	0	12	8
	4	T3	0	0	12	1

Table 2: Summary of 100-fold cross validations of 8 linear discriminant functions by exam scores.

	M1	M2	Diff.		
MNM 33s 4,2	0.00	0.07	0.07		
	0.00	<b>0.00</b>	0.00		
	0.00	0.01	0.01		
	0.00	<b>0.00</b>	0.00	M1Diff.	M2Diff.
HSVM 32s 4,0	0.00	0.81	0.81	0.00	<b>0.73</b>
	0.00	1.15	<b>1.15</b>	0.00	<b>1.15</b>
	0.00	0.90	0.90	0.00	<b>0.89</b>
	0.00	0.90	0.90	0.00	<b>0.90</b>
SVM4 31s 4,0	0.00	0.81	0.81	0.00	0.73
	0.00	1.15	<b>1.15</b>	0.00	1.15
	0.00	0.89	0.89	0.00	0.88
	0.00	0.90	0.90	0.00	0.90
SVM1 31s 1,0	0.00	0.81	0.81	0.00	0.73
	<b>0.72</b>	1.59	0.87	<b>0.72</b>	1.59
	<b>0.13</b>	0.98	0.85	<b>0.13</b>	0.97
	<b>0.76</b>	1.71	0.95	<b>0.76</b>	1.71
IPLP 45s 4,0	0.00	0.56	0.56	0.00	0.49
	0.00	0.63	0.63	0.00	0.63
	0.00	0.49	0.49	0.00	0.48
	0.00	0.47	0.47	0.00	0.47
LP 28s 4,0	0.00	0.96	0.96	0.00	0.89
	0.00	1.10	<b>1.10</b>	0.00	1.10
	0.00	0.95	0.95	0.00	0.94
	0.00	0.80	0.80	0.00	0.80
Logistic 20m50s 4,0	0.00	0.96	0.96	0.00	0.89
	0.00	1.10	<b>1.10</b>	0.00	1.10
	0.00	0.95	0.95	0.00	0.94
	0.00	0.80	0.80	0.00	0.80

LDF	9.64	10.54	0.90	9.64	10.47
4m50s	<b>9.89</b>	<b>10.55</b>	0.66	<b>9.89</b>	<b>10.55</b>
0,0	<b>9.48</b>	<b>10.09</b>	0.61	<b>9.48</b>	<b>10.08</b>
	<b>9.54</b>	<b>9.91</b>	0.37	<b>9.54</b>	<b>9.91</b>

#### 4.2 100 重交差検証法による汎化能力の検討

2012 年の中間試験の 10%水準の合否判定で MNM=0 になる 4 個の判別関数で 100 重交差検証法を行い Table2 の結果を得た。1 列目は MNM が改定 IP-OLDF, HSVM が H-SVM, SVM4 と SVM1 は S-SVM でペナルティ c を 10000 と 1 にした結果, IPLP は改定 IPLP-OLDF, LP は改定 LP-OLDF, Logistic はロジスティック回帰, LDF は Fisher の LDF の分析結果である。その下の数字は Elapsed Runtime (CPU) 時間である。4 個の異なった判別関数で、100 個の学習標本(各 124 件)から NM を計算し、124 で割って誤分類確率にした後で平均値 M1 を計算する。その後で得られた 100 個の判別関数を検証標本(各 12400 件)に適用し平均誤分類確率 M2 を求めた。最後の数字は、M1 と M2 が 0 になる判別関数の個数である。SVM1 は 1 個、LDF は 0 であり、線形分離可能なデータの認識能力が他の手法に比べて劣っている。SVM4 と SVM1 の比較から、ペナルティ c を 1 のように小さくすると、他の検証でも確認されているが識別力が劣っている。次に検証標本で検討すると、改定 IP-OLDF だけが 2 であり、他の 7 手法は平均誤分類確率が 0 でないことが分かる。Diff. は M2 と M1 の差であり、これが小さいと汎化能力が良いと考えられるが、考える判別関数で異なり、8 手法の比較には使えない。H-SVM 以下の手法では、各 M1 と M2 の値を対応する改定 IP-OLDF との差をとって M1Diff. と M2Diff. とした。特に M2Diff. の値が大きいくほど、改定 IP-OLDF より汎化能力が悪いといえる。特に H-SVM は SV 間の距離を最大化することで汎化能力が高いことを証明したが、本研究で改定 IP-OLDF に比べて悪いだけでなく、他の手法に比べても優位性を見出せない。16 個の MNM=0 になるスイス銀行紙幣データや 48 個の MNM=0 になる日本車の判別でも似たような結果である。

#### 4.3 判別係数の 95%信頼区間

100 重交差検証法の学習標本で得られた 100 個の判別係数の分布の 2.5%と 97.5%からリサンプリング 95%信頼区間を求めることができる。そこで得られた判別関数の係数を比較する。括弧の中の数字は平均値、2.5%と 97.5%の値であるが、100 個の全てが一定値の場合は 1 個の数字だけを示す。以下が改定 IP-OLDF の結果である。大きな特徴は、(T2, T4) を用いた MNM24 と T1 を付け加えた MNM123 は 100 個の判別係数が同じ整数値である。MNM24 に T3 を加えて平均値を判別係数に選ぶと  $MNM234=2.77*T2+0.4*T3+0.79*T4-31.9$  が得られるが、95%信頼区間は幅を持って変動する。しかしいずれも 95%信頼区間は 0 を含まず、正か負のいずれかである。  
 $MNM1234=(0.15, 0.15, 0.24)*T1+(1, 27, 0.39, 1.32)*T2$   
 $+ (0.41, 0.33, 0.41)*T3+(0.42, 0.19, 0.43)*T4$   
 $+ (-17.86, -18.38, -9.38).$   
 $MNM124=-0.67*T1+14*T2+4*T4-147.$   
 $MNM234=(2.77, 2.66, 2.8)*T2+(0.4, 0.32, 0.4)*T3$   
 $+ (0.79, 0.76, 0.8)*T4+(-31.9, -33.2, -30.61).$

$$MNM24=13*T2+4*T4-146.$$

他の全ての判別関数の判別係数は一定値になるものがない。以下に MNM124 と比較を行う。T1 の 95%信頼区間が全て 0 を含んでいて判別係数は 0 と考えるべきであり、結局 (T2, T4) を選ぶことになる。

$$HSVM=(0.58, \underline{-0.23}, 5.01)*T1+(4.01, 0.24, 12.4)*T2+(1.53, 0.28, 4)*T4+(-55.15, -145.4, -7.83).$$

$$SVM4=(0.58, \underline{-0.23}, 5.01)*T1+(4.01, 0.24, 12.4)*T2+(1.53, 0.23, 4)*T4+(-55.15, -145.4, -7.82).$$

$$SVM1=(0.28, \underline{-0.11}, 0.74)*T1+(0.92, 0.22, 1.72)*T2+(0.47, 0.24, 0.78)*T4+(-16.55, -29.65, -7.35)$$

$$IPLP=(0.23, \underline{-0.67}, 3.25)*T1+(4.54, 0.26, 14)*T2+(1.51, 0.28, 4)*T4+(-55.08, -147, -7.25).$$

$$LP=(0.21, \underline{-0.67}, 3.25)*T1+(4.57, 0.38, 14)*T2+(1.51, 0.28, 4)*T4+(-55.07, -147, -7.62).$$

Fisher の LDF とロジスティック回帰の 100 重交差検証法は、判別係数を出力していない。そこで元のデータで  $y_i$  を目的変数として重回帰分析すれば得られた回帰係数が判別係数に比例することがプラグイン規則で分かっているので重回帰分析で Table3 の結果を得た。検証標本を擬似的な母集団と考えて母判別係数 (Coeff.) と推測統計学で得られた 95%信頼区間の 2.5%と 97.5%を示す。そして 100 個の学習標本を擬似母集団からサンプリングされた 100 個の標本と考へ、そこで求める 95%信頼区間に擬似母集団の判別係数が含まれない個数を Outlier 行に示す。平均して 5 個前後の数字が期待される。最初は変数増加法で選ばれた 1 変数 (T4) の結果である。次は 2 変数 (T4, T2) の結果で、追加された T2 の 100 個の 95%信頼区間から母回帰係数 0.079 がはみ出す数が 8 個あることを示す。次の 3 変数 (T4, T2, T1) では T2 と定数項で 6 個は信頼区間外にある。次の 3 変数 (T4, T2, T3) は変数増加法では選ばれていない。以上から 95%信頼区間は利用できそうだ。

Table 3: Examination of Fisher's LDF by the regression analysis

	T1	T2	T3	T4	c
Coeff.				0.034	-0.058
2.5%				0.033	-0.082
97.5%				0.035	-0.033
Outlier				0	2
Coeff.		0.079		0.025	-0.65
2.5%		0.075		0.024	-0.68
97.5%		0.083		0.026	-0.61
Outlier		8		4	3
Coeff.	0.0059	0.075		0.023	-0.675
2.5%	0.0038	0.071		0.022	-0.714
97.5%	0.008	0.079		0.024	-0.637
Outlier	3	6		4	6
Coeff.		0.079	0.007	0.024	-0.654
2.5%		0.075	0.004	0.023	-0.691
97.5%		0.083	0.01	0.025	-0.616
Outlier		7	0	4	3
Coeff.	0.0058	0.075	0.007	0.023	-0.683
2.5%	0.0037	0.071	0.0042	0.022	-0.722
97.5%	0.0079	0.0079	0.0099	0.024	-0.645
Outlier	5	6	2	7	3

ロジスティック回帰は、Firth<sup>3)</sup>が線形分離可能なデータでは最尤推定法が不安定になると指摘している。擬似母集団で分析するとロジスティック回帰係数と定数項はフルモデルで-3.02, -24.97, -7.77, -8.27, 351.05 であり、標準誤差は 328, 11234, 574, 326, 12048 と非常に大きい。他のロジスティック回帰でも同じく全ての標準誤差は異常に大きい。しかし学習標本のように少ないケース数の分析では、全てのロジスティック回帰係数が不安定にならないこともある。JMP で収束計算が不安定という Warning で停止し、改定 IP-OLDF で MNM=0 になることを確認し、判別結果が ROC 曲線<sup>18)</sup>で NM=0 になるものがある場合を、ロジスティック回帰で線形分離可能と判定した。他の分析結果に習えば  $p=0.5$  の NM を検討すべきであり、他の手法の判別結果より良いほうにバイアスがかかっている。

## 5 まとめと共同プロジェクトの提案

本研究では、IP-OLDF で分かる判別分析の新しい知見を紹介し、判別分析の 3 つの問題が改定 IP-OLDF で解決できることを示した。そして、小標本のための 100 重交差検証法を用いて、8 個の線形判別関数の汎化能力と判別係数の 95%信頼区間の比較を行った。筆者がヒューリスティックなアプローチで MNM 基準による最適線形判別関数のある学会誌の投稿した際、「MNM 基準による LDF は学習標本で Over-fit するので、検証標本で汎化能力が悪くなる統計の常識を無視した提案と断じられた。そして正規分布を仮定した Fisher の LDF は検証標本で汎化能力が良いと考えるべきと指摘された」。確かにその通りかもしれないが誰も実証研究で確認していないと考えて「医用電子と生体工学」に投稿し掲載された<sup>11)</sup>。本研究は、実証研究で MNM 基準による改定 IP-OLDF の有用性を確認するため、1997 年以降に IP を用いて IP-OLDF と改定 IP-OLDF を開発し、数多くの研究データを用いて実証研究を行ってきた。用いたデータは、Fisher が LDF の検証に用いた Fisher の Iris データ、スイス銀行紙幣データ、多重共線性のある CPD データ<sup>19)</sup>、学生の成績データである。銀行データで線形分離可能な判別の重要性が分かり、学生データで判別超平面上の問題と解決法が分かった。そこで 2010 年から応用研究として、銀行データに加えて試験の合否判定で線形分離可能な判別に取り組んだ。その多くの時間は「QDF で class2 が class1 に誤判別される問題 3 の解決に時間が割かれ、ようやく 2012 年末に一方の群の変数値が一定で他群がばらつくときに起きる問題であることが分かった」。この解決を受け、本来の目標である各種 LDF の中で、どの LDF が一番汎化能力が優れているかを 100 重交差検証法で 2013 年から取り組み改定 IP-OLDF が一番良いことが分かった。また判別分析は推測統計学と無縁であり (Fisher の仮説から母誤分類確率と標本誤分類確率の関係は分かっている<sup>10)</sup>)、判別係数の 95%信頼区間が分からなかった。これは 100 重交差検証法の数値結果の分布を用いて解決できた。

本研究結果は、以下の 2 種のデータでも確認したが、紙面の都合で合否判定にとどめた。

1) スイス銀行紙幣データでは 2 変数 (X4, X6) で MNM=0 であり、6 個の説明変数の全ての組み合わせ 63 個のうち 16 個で MNM=0 になる。

2) 普通車 29 車種と小型車 15 車種を 6 個の性能で判別する「車の判別データ」は、総排気量と座席数の各 1 変数で MNM=0 になるので、63 個の判別関数のうち 48 個が MNM=0 になる。

判別分析は、医学診断、ゲノム診断、パターン認識などで重要な手法である。すでに述べたとおり既存の判別関数には問題があり判別結果も悪い。例えば医学診断で誤分類確率が大きいので、間違った結論や研究を諦めたものも多いと考え、重要な研究課題は見直す必要がある。

### 共同プロジェクトの提案

判別分析にかかわる研究を見直すために、学会あるいは医学部と共同研究を立ち上げることを提案したい。筆者は、判別分析にかかわる計算を引き受ける、あるいはそれに関する技術を提供することで協力したいと考えている。

### 参考文献

- 1) N. Cristianini & J. Shawe-Taylor (大北剛訳) : サポートベクターマシン入門. 共立出版, 2005.
- 2) B. Efron: Bootstrap Methods -Another Look at the Jackknife-, The Annals of Statistics, 7/1, 1-26, 1979.
- 3) D. Firth: Bias reduction of maximum likelihood estimates. Biometrika, 80, 27-39, 1993.
- 4) R.A. Fisher: The use of multiple measurements in taxonomic problems. Annals of Eugenics, 7, 179-188, 1936.
- 5) B.Flury & H.Rieduy: Multivariate statistics -A practical approach-. Cambridge University Press, 1988. [田端吉雄訳, 多変量解析とその応用, 1900.]
- 6) J.H. Friedman, Regularized Discriminant Analysis. Journal of the American Statistical Association, 84/405, 165-175, 1989.
- 7) J.H. Goodnight: SAS Technical Report- The Sweep Operator: It's Importance in Statistical Computing - (R-100). SAS Institute Inc. 1978.
- 8) 石井健一郎, 上田修功, 前田英作, 村瀬洋: 分かり易いパターン認識. オーム社,1988.
- 9) P. A. Lachenbruch & M. R. Mickey: Estimation of error rates in discriminant analysis. Technometrics 10, 1-11, 1968.
- 10) A. Miyake & S. Shinmura: Error rate of linear discriminant function, F.T. de Dombal & F.Gremy, edit 435-445, North-Holland, 1976.
- 11) 三宅章彦, 新村秀一: 最適線形判別関数のアルゴリズムとその応用, 医用電子と生体工学, 18/1, 15-20,1980.
- 12) J. Sall (新村秀一訳): SAS による回帰分析の実践, 朝倉書店, 東京,1986.
- 13) J.P. Sall, L. Creighton, & A. Lehman (新村秀一監修): JMP を用いた統計およびデータ分析入門 (第3版). SAS Institute Japan (株), 2004.
- 14) L. Schrage: LINDO -An optimization modeling system-. The Scientific Press,1981. [新村秀一, 高森寛, 実践数理計画法. 朝倉書店,1992. ]
- 15) L. Schrage: Optimizer Modeling with LINGO. LINDO Systems Inc, 2003.

- 16) A. Stam: Nontraditional approaches to statistical classification: Some perspectives on Lp-norm methods. Annals of Operations Research,74, 1-36, 1997.
- 17) 新村秀一, 北川護, 高木義人, 野村裕: 二段階重みづけによるスペクトル診断, 第12回日本ME学会大会論文集, 107-108, 1973.
- 18) 新村秀一, 鈴木隆一郎, 中西克己: 各種判別手法を用いた医療データ解析の標準化 - マンモグラフィによる乳癌の診断 - 医療情報学, 3/2, 39-50,1983.
- 19) 新村秀一, 三宅章彦: 重回帰分析と判別解析のモデル決定 (1) -19 変数をもつ CPD データの多重共線性の解消-, 医療情報学, 3/3, 107-124,1983.
- 20) 新村秀一: 医療データ解析, モデル主義, そして OR, オペレーションズ・リサーチ, 29/7, 415-421,1984.
- 21) 新村秀一: 数理計画法を用いた最適線形判別関数. 計算機統計学. 11/2,89-101,1997.
- 22) 新村秀一, 垂水共之: 2 変量正規乱数データによる IP-OLDF の評価. 計算機統計学,12/2, 107-123,1999.
- 23) S. Shinmura: A new algorithm of the linear discriminant function using integer programming. New Trends in Probability and Statistics, 5, 13-142, 2000.
- 24) 新村秀一: JMP による統計学とおき勉強法, 講談社, 2004.
- 25) 新村秀一: 改定 IP-OLDF による SVM のアルゴリズム研究, オペレーションズ・リサーチ, 51/11, 702-707, 2006.
- 26) 新村秀一: 改定 IP-OLDF による IP-OLDF の問題点の解消, 計算機統計学, 19/1,1-16,2007.
- 27) 新村秀一: Excel と LINGO で学ぶ数理計画法, 丸善, 2007.
- 28) 新村秀一: 数理計画法による判別分析の 10 年. 計算機統計学, 20/1&2, 59-94, 2007.
- 29) 新村秀一: 線形計画法による改定 IP-OLDF の計算時間の改善. 計算機統計学, 22/1, 37-57, 2009.
- 30) 新村秀一: 最適線形判別関数. 日科技連出版社, 2010.
- 31) 新村秀一: 数理計画法による問題解決法. 日科技連出版社, 2011.
- 32) 新村秀一: 合否判定データによる判別分析の問題点. 応用統計学, 40/3, 157-172, 2011.
- 33) 新村秀一: SAS/JMP との歩み, SAS Technical Report, 13/16, 2012.
- 34) S. Shinmura: End of Discriminant Functions based on Variance Covariance Matrices. ICORER, 5-14, 2014.
- 35) S. Shinmura: Improvement of CPU time of Linear Discriminant Functions based on MNM criterion by IP. Statistics, Optimization & Information Computing, 1-28, 2014 (accepted).
- 36) H. M. Markowitz: Portfolio Selection, Efficient Diversification of Investment. John Wiley & Sons, Inc. 1959.
- 37) 田口玄一: タグチメソッドわが発想法, 経済界, 1999.
- 38) V. Vapnik: The Nature of Statistical Learning Theory. Springer-Verlag, 1995.
- 39) R. Warmack & R. C. Gonzalez: An Algorithm for the optimal solution of linear inequalities and its application to pattern recognition, IEEE Trans. Computers, 1065-1075,1973.



# 6軸センサ付きカメラを用いた三次元計測のための対応点分類手法

○赤松俊弘 董芳艶 廣田薫 (東京工業大学)

## Classification of Corresponding Points for 3D Measurement Using Camera attached with 6-axis Sensor

\* T. Akamatsu, F. Dong, and K. Hirota (Tokyo Institute of Technology)

**Abstract**— A classification method of corresponding points is proposed using a moving camera attached with a 6-axis sensor. It makes possible to classify corresponding points between 2 consecutive frames containing still/moving objects and choose appropriate corresponding points for 3D measurement. Corresponding point classification experiment with original CG images shows that accuracy is 0.97, precision is 0.96, and recall is 1.00. The proposed method is planning to be included in 3D measurement method with actual images containing still/moving objects and also to be applied to obstacles avoidance for vehicles or mobile robot vision.

**Key Words:** 3D measurement, Corresponding points classification, 6-axis sensor, Moving camera

### 1 序論

静止ステレオカメラを用いて単一（静止あるいは移動）対象物までの距離や形状を計測する<sup>1)2)3)</sup>には、対象物を撮影した左右2枚の画像から抽出した対応点を用い、基礎方程式を解いて $3 \times 3$ の基礎行列 $F$ を求めるのが一般的である。基礎行列を求めるためには対応点が最低7組必要である<sup>4)</sup>ことに加え、障害物回避用の車載カメラや移動ロボットの観測画像などの実用を想定すると、フレームごとに2枚ずつの画像が必要であるため計算コストもかかる。移動単眼カメラを用いる場合、フレームごとに必要な画像は1枚に抑えられる<sup>5)</sup>が、撮影シーン内に静止対象物と移動対象物が混在している状況では、基礎行列を求めるのに必要な静止対象物の対応点7組を選別するのは難しい。また、どちらの場合も対応点を抽出する時点での誤対応や対応点座標の誤差の問題<sup>6)</sup>、さらに、対応関係をより正確に修正するためのバンドル調整<sup>7)</sup>コストの問題がある。

そこで本論文では、6軸センサ（3軸加速度センサと3軸角速度センサを組み合わせたもの）を単眼移動カメラに装着したデバイスを用いて、デバイスの回転角度と移動距離情報を利用して対応点を静止・移動点へ分類する手法を提案し、それらを基礎行列の同定に利用する三次元計測手法の基礎を確立する。

提案手法では、静止・移動混在の複数対象物が撮影された単眼カメラ2フレームの対応点を、2フレーム間で静止・移動に分類することが出来る。また、誤対応の除去および対応点座標のより正確な組を選別することによるバンドル調整時のコスト削減も可能である。

静止・移動対象物が混在するシーンをCGで作成し、計算機上でPython 2.7を用いて提案手法による対応点の分類を行う。

2で6軸センサ装着単眼カメラによる複数移動・静止対象物の対応点分類手法を提案し、3でCGテスト画像を用いた対応点分類実験とその結果を述べる。

### 2 6軸センサ付き移動単眼カメラを用いた対応点分類手法

#### 2.1 対応点の分類条件

静止対象物の対応点間の関係は基礎方程式と呼ばれ、

$$\mathbf{p}^T \mathbf{F} \mathbf{p} = 0 \quad (1)$$

で表される。ここで $\mathbf{p}$ ,  $\mathbf{p}'$ は抽出した対応点の画像上の座標を同次座標に変換したものであり、画像上の座標は画像中心を原点とし上方を $x$ 軸、右方を $y$ 軸とする。静止対象物と移動対象物が混在している状況では、静止対象物と移動対象物の分類条件は式(1)より

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{p} \text{ and } \mathbf{p}' \text{ belong to still object} \\ \Rightarrow \mathbf{p}^T \mathbf{F} \mathbf{p} = 0 \\ \mathbf{p} \text{ and } \mathbf{p}' \text{ belong to moving object}' \\ \Rightarrow \mathbf{p}^T \mathbf{F} \mathbf{p} \neq 0 \end{array} \right. \quad (2)$$

となる。

#### 2.2 6軸センサを用いた対応点ごとの焦点距離推定手法および分類基準の提案

三次元計測には基礎行列が必要であるが、移動単眼カメラが静止対象物と移動対象物が混在しているシーンを観測している場合には、基礎行列の推定に必要な7組以上の静止対象物の対応点を選別するのが難しい。そこで基礎行列を求めるために、6軸センサを移動単眼カメラに装着したデバイスを用いて各対応点を静止・移動点に分類する手法を提案する。

基礎行列はカメラの内部パラメータおよび外部パラメータに分解でき、

$$\mathbf{F} = \mathbf{K}^T \mathbf{R} [\mathbf{t}]_{\times} \mathbf{K}, \quad (3)$$

と表される。ここで $\mathbf{K}$ および $\mathbf{K}'$ はカメラの内部パラメータ、 $\mathbf{R}$ はカメラの回転行列、 $\mathbf{t}$ は並進ベクトルを表し、 $[\cdot]_{\times}$ は歪対称行列の演算子である。いまカメラの内部パラメータの内、アスペクト比を1、歪み係数を0、画像中心を $(0, 0)$ 、カメラの移動前後で焦点距離 $f$ が変わらないと仮定すると、

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}' = \begin{pmatrix} f & 0 & 0 \\ 0 & f & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4)$$

となり、これを式(1)に代入すると

$$\mathbf{p}'^T \begin{pmatrix} f & 0 & 0 \\ 0 & f & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{R}[\mathbf{t}]_x \begin{pmatrix} f & 0 & 0 \\ 0 & f & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \mathbf{p} = 0, \quad (5)$$

となる。ここで $\mathbf{R}$ および $\mathbf{t}$ を6軸センサにより推定した結果を用いると、式(5)は $f$ についての二次方程式に帰着できる。すなわち式(5)が異符号の解をもつことが静止対象物の対応点の候補となるために必要な条件である。ここで、式(5)の左辺を展開し、各項の係数を $A$ 、 $B$ 、 $C$ と置く。さらに全体を $Crt(f)$ と置くと、

$$Crt(f) = Af^2 + Bf + C = 0, \quad (6)$$

となる。このとき

$$\mathbf{R}[\mathbf{t}]_x = \mathbf{E} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} \\ E_{21} & E_{22} & E_{23} \\ E_{31} & E_{32} & E_{33} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$\mathbf{p} = (x, y, 1)^T$ 、 $\mathbf{p}' = (x', y', 1)^T$ と置くと、式(6)の係数はそれぞれ

$$A = xx'E_{11} + xy'E_{21} + yx'E_{12} + yy'E_{22}, \quad (8)$$

$$B = xE_{31} + yE_{32} + x'E_{13} + y'E_{23}, \quad (9)$$

$$C = E_{33} \quad (10)$$

となる。従って、静止対象物の対応点候補となる条件は $A$ と $C$ が異符号であること、すなわち

$$AC < 0 \quad (11)$$

である。

### 2.3 誤対応の除去と座標誤差の評価

静止対象物の対応点でなくても、誤対応や移動対象物がデバイスと平行に移動するなどの特殊な条件化で式(11)を満たしてしまう場合がある。これらを排除するために候補から静止対象物の対応点を選別する手法を提案する。候補のうち静止対象物の対応点同士は同一の基礎行列で表現されるため式(6)の解である $f$ も同一である。従って、式(6)の軸を用い評価関数 $Evl$ を

$$Evl = -\frac{B}{2A}, \quad (12)$$

と定義すると、静止対象物以外の対応点の $Evl$ の値は外れ値となり、除去できる。また $Evl$ は対応点の正確さを評価する指標としても利用でき、 $Evl$ の頻度の高い範囲の対応点により正確なものとみなせるので、それらを基礎行列の推定に用いることで推定精度を高めコストを削減することができる。

## 3 対応点分類手法検証実験

### 3.1 対応点分類実験の環境

提案手法の妥当性を検証するために、シミュレーションによる対応点分類実験を行う。入力画像はBlender<sup>8)</sup>により作成したCG画像を用いる。CG画像はデバイスの移動前および移動後の2枚である。これら2枚の入力画像より対応点を抽出する。対応点はOriented-BRIEF (ORB)<sup>9)</sup>を用いて抽出する。これらを提案手法により静止対象物と移動対象物に分類し、その分類精度を確認する。実験に用いる計算機はWindows 7 Professionalで64 bit OS、CPUはIntel® Core™ i5-3210M CPU 2.50 GHz、実装メモリ (RAM) は8.00 GBである。システムはPython 2.7を用いてコーディングしている。

### 3.2 対応点分類シミュレーション実験

実験に使用するデバイスの移動前の画像をFig. 1、移動後の画像をFig. 2に示す。入力画像の物体の内、立方体が静止対象物、車とヘリコプタが移動対象物である。車は床上を平行移動、四角錐は空中を平行および回転移動している。各対象物とデバイスの移動方向および位置関係をFig. 3に示す。デバイスに対し上方を $x$ 軸、右方を $y$ 軸、前方を $z$ 軸とすると、デバイスの並進ベクトル $\mathbf{t}$ は $t_x = -0.50$ 、 $t_y = -1.00$ 、 $t_z = 1.00$ 、回転角度は $x$ 軸回りに $\pi/12$  radである。

入力画像よりORBを用いて抽出した対応点をFig. 4に示す。抽出された対応点は全39組であり、内24組が静止対象物である立方体に属する対応点である。

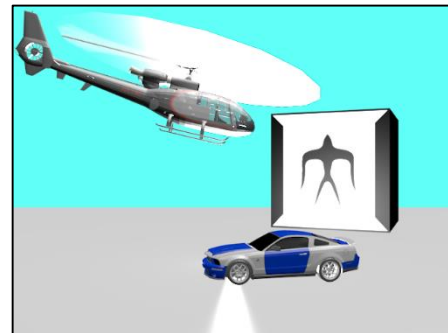


Fig. 1: The image from viewpoint before the device movement.

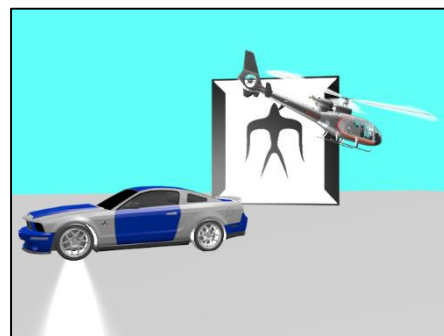


Fig. 2: The image from viewpoint after the device movement.

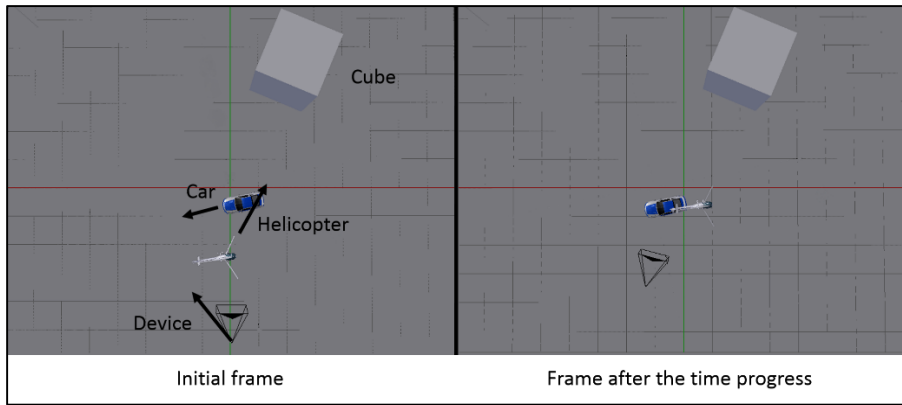


Fig. 3: The bird's-eye view image of positional relation between objects and device.

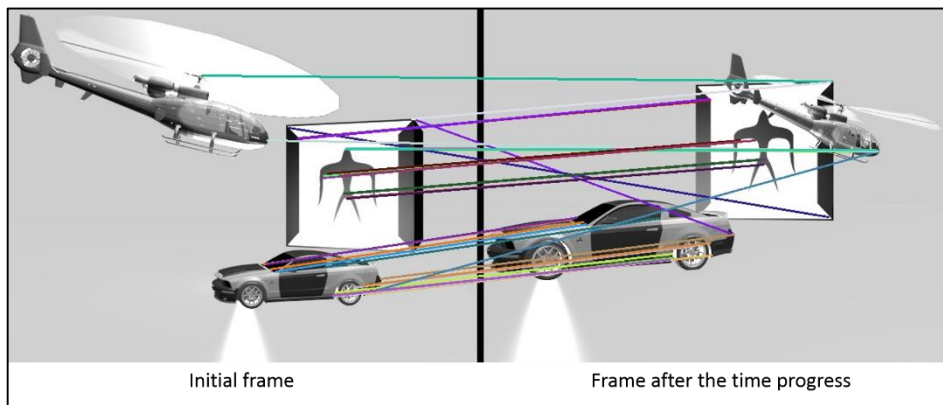


Fig. 4: The image of extracted corresponding points.

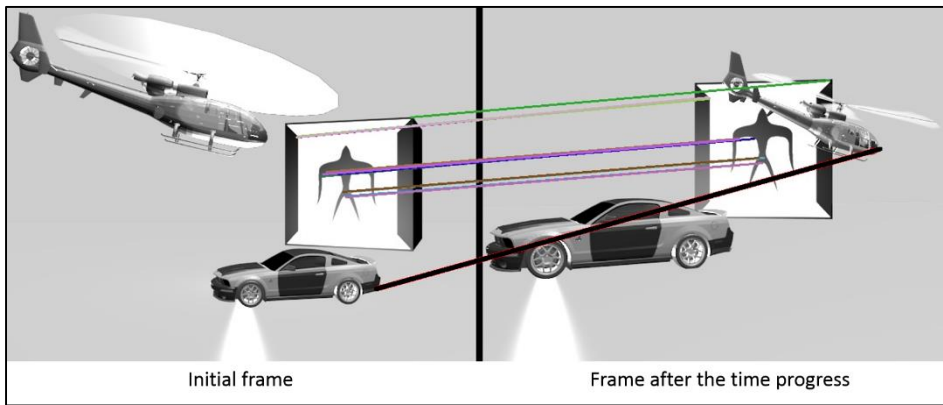


Fig. 5: The image of classified corresponding points that belong to still object.

次に対応点分類の精度を検証する。提案手法により静止対象物の対応点であると判定された組は全 39 組中 25 組, そのうち真に静止対象物に属する組は 24 組であり, 残りの 1 組は誤対応の組である (Table 1) .

Table 1: The experimental result of corresponding points classification.

True Positive	24
False Positive	1
False Negative	0
True Negative	14
Total	39

Fig. 5 に静止対象物に属すると判定された対応点を示す. この結果を指標にまとめると, 正解率は 0.97, 適合率は 0.96, 再現率は 1.00 をとなり, F 値は 0.98 となる (Table 2) .

Table 2: The index of classification experimental result.

Accuracy	0.97
Precision	0.96
Recall	1.00
F-measure	0.98

最後に誤対応を除去が可能であることを検証する. Fig. 6 は誤対応を含め静止対象物の対応点と判定された 25 組の  $E_{vl}$  の値のヒストグラムである. 誤対応の 1 組の

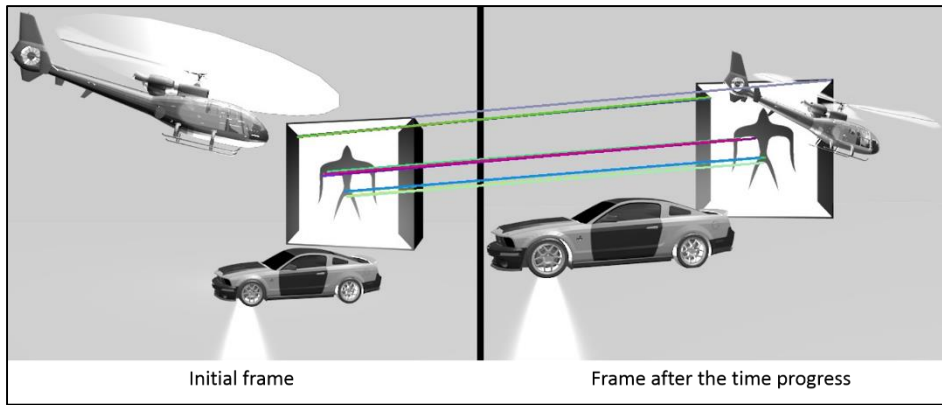


Fig. 7: The image of revised corresponding points.

みが外れ値となっていることが確認でき、さらに-0.01から-0.008の範囲の頻度が高くなっていることから、この範囲の対応点の精度がより高いことがわかる。Fig. 7は $Evl$ を用いて外れ値を除去した対応点の図である。除去にはInterquartile Range (IQR)を用いた外れ値検定を用いている。Fig. 5と比較すると車とヘリコプタの誤対応が除去されており、結果として、正確に静止物体の対応点のみを抽出できていることが確認できる。

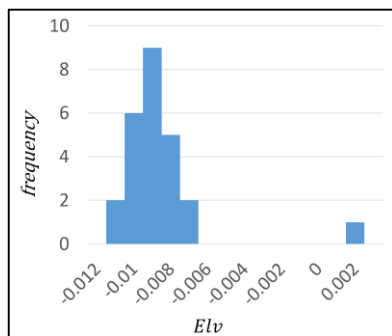


Fig. 6: The histogram of  $Evl$  for each candidate of still corresponding point.

#### 4 結論

移動・静止対象物混在のCGテスト画像を用いた対応点分類実験で、ORBにより抽出された全対応点39組中静止対象物に属する対応点は24組であるが、提案手法で静止対象物と判定された対応点は誤対応1組を含む25組である。これにより正答率0.97、適合率0.96、再現率1.00の結果を得ている。さらに対応点ごとに算出した $Evl$ に対してIQRを用いた外れ値検定を適用することにより、誤対応を除去できることを確認している。

提案手法を実画像へ用いた場合の精度を検証中であり、今後それを車載カメラやモバイルロボットに組み込むことによる障害物回避や移動制御への応用を検討している。

#### 参考文献

1) R. Hartly and C. Silpa-Anan : Reconstruction from two views using approximate calibration, Proceedings of 5th Asian Conference on Computer Vision, **Vol. 1**, 338/343(2002)

2) R. Hartley and A. Zisserman : Multiple View Geometry in Computer Vision Second Edition, Cambridge University Press, March (2004)

3) K. Kanatani and Y. Sugaya : Compact fundamental matrix computation, IPSJ Transactions on Computer Vision and Applications, **Vol. 2**, 59/70(2010)

4) O. D. Faugeras : Stratification of three-dimensional vision: projective, affine, and metric representations. Journal of the Optical Society of America, **Vol. 12**, No. 3, 465/484(1995)

5) Z. Hu and Z. Tan : Depth recovery and affine reconstruction under camera pure translation, Pattern Recognition, **Vol. 40**, Issue 10, 2826/2836(2007)

6) Z. Zhang, R. Deriche, O. D. Faugeras, and Q. Luong : A Robust Technique for Matching Two Uncalibrated Images Through the Recovery of the Unknown Epipolar Geometry. Research Report 2273(1994)

7) K. Kanatani and Y. Sugaya : Implementation and evaluation of bundle adjustment for 3-D reconstruction, Proceedings of the 17th Symposium on Sensing via Imaging Information, IS4-02-1/IS4-02-8(2011)

8) <http://www.blender.org/>

9) E. Rublee, V. Rabaud, K. Konolige, and G. Bradski : ORB: an efficient alternative to SIFT or SURF, Proceedings of the IEEE International Conference on Computer Vision, 2564/2571(2011)

# カメラ奥行方向 Hand-eye-vergence ビジュアルサーボ

崔 禹 前田 耕市 西村 健太 須浪 唯介  
見浪 護 矢納 陽 松野 隆幸 (岡山大学)

## Hand-eye-vergence Visual Servoing in Camera-depth Direction

Y. Cui K. Maeda K. Nishimura Y. Sunami  
M. Minami A. Yanou and T. Matsuno (Okayama University)

**Abstract**– In this research, two hand-eye cameras mounted on the hand of a robot are utilized for visual information. It is difficult for a hand-eye configuration fixed at hand to keep target's projected position in camera image frame at the center, since the hand's dynamical oscillation inevitably defect the hand-eye visual servoing feedback information. In order to overcome defaults of the fixed-hand-eye system, hand-eye-vergence system is proposed on a view point that the visual servoing controller of the hand and eye-vergence should be separated. In this system, left and right cameras can be rotated to observe and keep the target object to be seen at the center of camera images, depressing the influences of aberration of camera lens. In addition it is hard to recognize the target moving in camera-depth direction because of the less sensitivity than lateral camera motions. To resolve this problem, the real-time evolutionary pose tracking system that enables on-line pose estimation using Genetic Algorithms is utilized. We have confirmed the effectiveness of the hand-eye-visual servoing system through experiments using real robot. And this system can improve the observability and tracking ability on visual servoing in camera-depth direction.

**Key Words:** Visual Servoing, Eye-vergence, GA

## 1 Introduction

Visual servoing is a control method of robot's motion through visual information in the feedback loop, which is obtained from visual cameras [1]-[4]. Some methods have already been proposed to improve observation abilities, by using stereo cameras [5], multiple cameras [6], and two cameras; with one fixed on the end-effector, and the other done in the workspace [7]. These methods obtain different views to observe the object by increasing the number of cameras, leaving the system less adaptive for changing environment.

Recent researches on visual servoing are limited generally in a swath of tracking an object while keeping a certain constant distance [8]-[10]. But the final objective of visual servoing seems to lie in approaching the end-effector to a target object and then work on it, like grasping. In this case, the desired relation between cameras and the object is time varying, so such eye-vergence camera system is indispensable to keep suitable viewpoint all the time during the approaching visual servoing, utilizing the changeable cameras' eye direction so as to look the target the center of camera images. The other merit of eye-vergence is concerning dynamical effects to keep tracking a moving target in the camera's view. For example, when people keep tracking a moving object, they may catch up to the object in case of the object moving slowly, but when the object become to move faster and faster, human's face cannot be kept positioned squarely to the object, while human's eye can still keep staring at the object because of its small mass and inertial moment. Needless to say in visual servoing application, keeping closed loop of visual feedback is vital

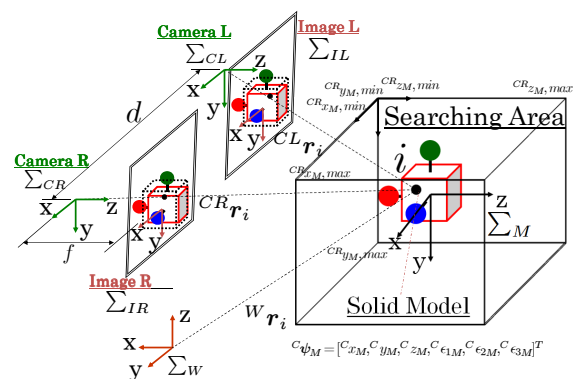


Fig. 1: Coordinate systems of dual eyes

from a view point of closed loop control stability. By a previous work, it has been clarified that the eye-vergence system has superior stability and trackability performances in pose tracking dynamical motions. However, pose tracking of longitudinally moving object has a difficulty for depth distance to be estimated than laterally moving one, because the image changes becomes less in cameras' view against when the object's motion in real world. In this report, we conduct some visual servoing experiments about object's longitudinal movement, and confirmed that the full 3D visual servoing can be achieved. From the experiment results, we verified about the error of object estimation by showing the action of GA in time-domain during visual servoing.

## 2 3D Pose Tracking Method

In this paper, we take a rectangular solid block as an example of the target to explain The 3D Pose Tracking Method. The shape and color of the solid block

is assumed to be known. Other different kinds of targets can also be measured by model-based matching strategy if their character is given.

## 2.1 Kinematics of Stereo-Vision

We utilize perspective projection as projection transformation. Fig. 1 shows the coordinate system of the dual-eyes vision system. The target object's coordinate system is represented by  $\Sigma_M$  and image coordinate systems of the left and right cameras are represented by  $\Sigma_{IL}$  and  $\Sigma_{IR}$ . A point  $i$  on the target can be described using these coordinates and homogeneous transformation matrices. At first, a homogeneous transformation matrix from right camera coordinates,  $\Sigma_{CR}$  to  $\Sigma_M$  is defined as  ${}^{CR}\mathbf{T}_M$ . And an arbitrary point  $i$  on the target object in  $\Sigma_{CR}$  and  $\Sigma_M$  is defined  ${}^{CR}\mathbf{r}_i$  and  ${}^M\mathbf{r}_i$ . Then  ${}^{CR}\mathbf{r}_i$  is,

$${}^{CR}\mathbf{r}_i = {}^{CR}\mathbf{T}_M {}^M\mathbf{r}_i. \quad (1)$$

Where  ${}^M\mathbf{r}_i$  is predetermined fixed vectors. Using a homogeneous  $\Sigma_W$  to  $\Sigma_{CR}$ , i.e.,  ${}^W\mathbf{T}_{CR}$ , then  ${}^W\mathbf{r}_i$  is got as,

$${}^W\mathbf{r}_i = {}^W\mathbf{T}_{CR} {}^{CR}\mathbf{r}_i. \quad (2)$$

The position vector of  $i$  point in right image coordinates,  ${}^{IR}\mathbf{r}_i$  is described by using projection matrix  $\mathbf{P}$  of camera as,

$${}^{IR}\mathbf{r}_i = \mathbf{P} {}^{CR}\mathbf{r}_i. \quad (3)$$

By the same way as above.

$${}^{CL}\mathbf{r}_i = {}^{CL}\mathbf{T}_M {}^M\mathbf{r}_i. \quad (4)$$

$${}^W\mathbf{r}_i = {}^W\mathbf{T}_{CL} {}^{CL}\mathbf{r}_i. \quad (5)$$

$${}^{IL}\mathbf{r}_i = \mathbf{P} {}^{CL}\mathbf{r}_i. \quad (6)$$

Then position vectors projected in the  $\Sigma_{IR}$  and  $\Sigma_{IL}$  of arbitrary point  $i$  on target object can be described  ${}^{IR}\mathbf{r}_i$  and  ${}^{IL}\mathbf{r}_i$ . Here, position and orientation of  $\Sigma_M$  based on  $\Sigma_{CR}$  has been defined as  ${}^{CR}\psi_M$ . Then Eq.(3), Eq.(6) are rewritten as,

$$\begin{cases} {}^{IR}\mathbf{r}_i = \mathbf{f}_R({}^{CR}\psi_M, {}^M\mathbf{r}_i) \\ {}^{IL}\mathbf{r}_i = \mathbf{f}_L({}^{CL}\psi_M, {}^M\mathbf{r}_i). \end{cases} \quad (7)$$

This relation connects the arbitrary points on the object and projected points on the left and right images corresponding to a 3D pose  ${}^{CR}\psi_M$  of the object. The measurement of  ${}^{CR}\psi_M(t)$  in real time will be solved by consistent convergence of a matching model to the target object by a "1-Step GA".

## 2.2 Model-based matching

The 3D solid model is shown in Fig. 2. The model is constituted of inside space  $S_{in}$  and outside space  $S_{out}$ . The left and right 2D searching models, named  $S_L$  and  $S_R$ , are shown in Fig. 2(on the bottom).

Supposing there are distributed solid models in the searching space in  $\Sigma_W$ , each has its own pose  ${}^{CR}\psi_M$ ,  ${}^{CL}\psi_M$ . To determine which solid model is most close to the real target, a correlation function used fitness function in GA is defined for evaluation. Here, we

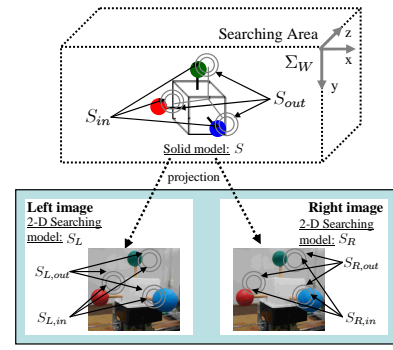


Fig. 2: Definition of a solid model and left/right searching models

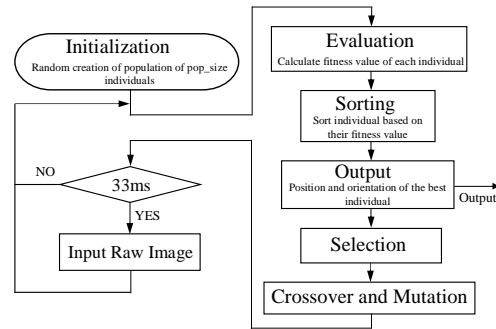


Fig. 3: Flow chart of 1-Step GA recognition

use color information to search for the target object in the images. In order to evaluate difference of hue value between the object and the searching model. The hue value of right image at the position  ${}^{IR}\mathbf{r}_i$  is expressed as  $p({}^{IR}\mathbf{r}_i)$ , and the hue value of left image at the position  ${}^{IL}\mathbf{r}_i$  is expressed as  $p({}^{IL}\mathbf{r}_i)$ .

$$\begin{aligned} F({}^C\psi_M) &= \left\{ \left( \sum_{{}^{IR}\mathbf{r}_i \in S_{R,in}({}^{CR}\psi_M)} p({}^{IR}\mathbf{r}_i) \quad \sum_{{}^{IR}\mathbf{r}_i \in S_{R,out}({}^{CR}\psi_M)} p({}^{IR}\mathbf{r}_i) \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \sum_{{}^{IL}\mathbf{r}_i \in S_{L,in}({}^{CL}\psi_M)} p({}^{IL}\mathbf{r}_i) \quad \sum_{{}^{IL}\mathbf{r}_i \in S_{L,out}({}^{CL}\psi_M)} p({}^{IL}\mathbf{r}_i) \right) \right\} / 2 \\ &= \{F_R({}^{CR}\psi_M) + F_L({}^{CL}\psi_M)\} / 2 \end{aligned} \quad (8)$$

Eq.(8) shows the fitness function that calculate the correlation function between the search model and image. When the searching model fits to the target object being imaged in the right and left images, then the fitness function  $F({}^C\psi_M)$  gives maximum value, i.e.,  $F = 1$ .

Therefore the problem of finding a target object and detecting its position/orientation can be converted to searching  ${}^C\psi_M$  that maximizes  $F({}^C\psi_M)$ . We solve this optimization problem by GA. The genes of GA representing possible pose solution  ${}^C\psi_M$  is defined as,

$$\underbrace{01}_{12bit} \underbrace{0100}_{12bit} \underbrace{0111}_{12bit} \underbrace{0101}_{12bit} \underbrace{0101}_{12bit} \underbrace{1101}_{12bit} \underbrace{10}_{12bit}.$$

The 72 bits of gene refers to the range of the searching area:  $150 \leq t_x \leq 150[mm]$ ,  $0 \leq t_y \leq 300[mm]$ ,

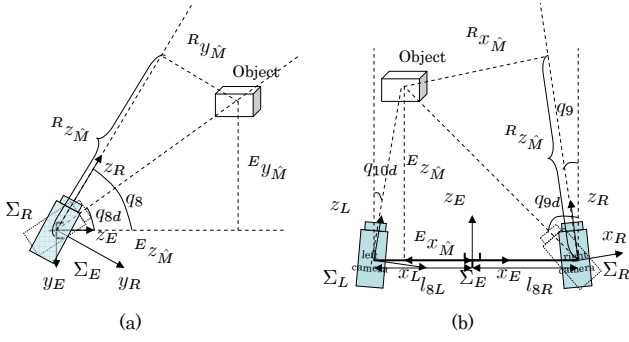


Fig. 4: Calculation of tilt and pan angles

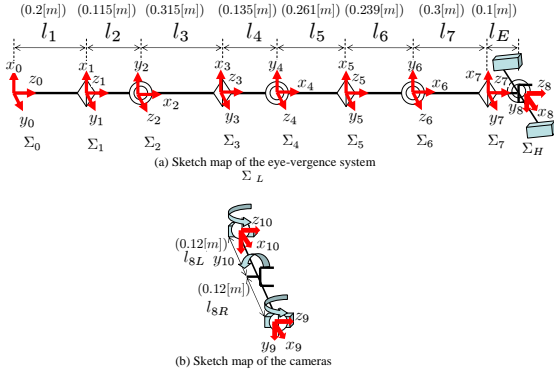


Fig. 5: Frame structure of manipulator

$650 \leq t_z \leq 950[mm]$ , and  $0.3 \leq i_1, i_2, i_3 \leq 0.3$ , where  $i$  is defined as quaternion and represents almost the same range of  $54 \leq roll, pitch, yaw \leq 54[deg]$ .

Although GA has been applied to a number of robot control systems [13], it has not been yet applied to a robot manipulator control system to track a target in 3D space with unpredictable movement in real time, since the general GA method costs much time until its convergence. So here, for real-time visual control purposes, we have employed GA in a way that we denoted as “1-Step GA” evolution. This means that the GA evolutionary iteration is applied one time to the newly input image. While using the elitist model of the GA, the most accurate pose of a target can be detected in every new image by the pose of the gene with highest fitness value. In addition, this feature happens to be favorable for real-time visual recognition. The flow chart of the 1-step GA process is shown in Fig. 3. The pose of the best gene is output in every newly input image on a on-line measurement result, to be used as command value to the manipulator’s controller. Thereby real-time visual servoing can be performed. Our previous research has confirmed the 2D recognition method enabled a eye-in-hand robot manipulator to catch a swimming fish by a net equipped at the hand [11]. Fig. 3 shows that the image inputting process is included in the GA iteration process seeking for the potential solution, i.e., toward the target. That is, the evolving speed to the solution in the image should be faster than the speed of the tar-

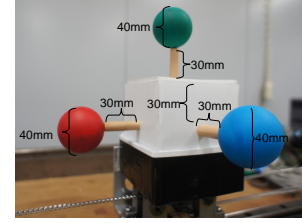


Fig. 6: 3D marker

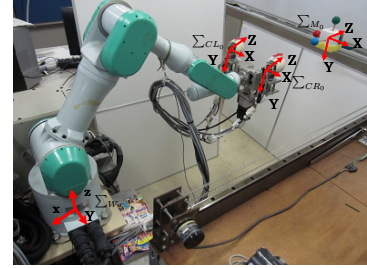


Fig. 7: Object and the visual-servoing system

get object in the successively input images, for the success of real-time recognition by “1-Step GA.”

### 3 Hand & Eye Visual Servoing Controller

#### 3.1 Hand Visual Servoing Controller

The block diagram of our proposed hand & eye-vergence visual servoing controller is shown in Fig. 8. The hand-visual servoing is the outer loop. Based on the above analysis of the desired-trajectory generation, the desired hand velocity  ${}^W \dot{\mathbf{r}}_d$  is calculated as,

$${}^W \dot{\mathbf{r}}_d = \mathbf{K}_{P_p} {}^W \mathbf{r}_{E,Ed} + \mathbf{K}_{V_p} {}^W \dot{\mathbf{r}}_{E,Ed}, \quad (9)$$

where  ${}^W \mathbf{r}_{E,Ed}$ ,  ${}^W \dot{\mathbf{r}}_{E,Ed}$  can be calculated from  ${}^E \mathbf{T}_{Ed}$  and  ${}^E \dot{\mathbf{T}}_{Ed}$ .  $\mathbf{K}_{P_p}$  and  $\mathbf{K}_{V_p}$  are positive definite matrix to determine PD gain.

The desired hand angular velocity  ${}^W \boldsymbol{\omega}_d$  is calculated as,

$${}^W \boldsymbol{\omega}_d = \mathbf{K}_{P_o} {}^W \mathbf{R}_E {}^E \Delta \epsilon + \mathbf{K}_{V_o} {}^W \boldsymbol{\omega}_{E,Ed}, \quad (10)$$

where  ${}^E \Delta \epsilon$  is a quaternion error [12] calculated from the pose tracking result, and  ${}^W \boldsymbol{\omega}_{E,Ed}$  can be computed by transforming the base coordinates of  ${}^E \mathbf{T}_{Ed}$  and  ${}^E \dot{\mathbf{T}}_{Ed}$  from  $\Sigma_E$  to  $\Sigma_W$ . Also,  $\mathbf{K}_{P_o}$  and  $\mathbf{K}_{V_o}$  are suitable feedback matrix gains. We define the desired hand pose as  ${}^W \boldsymbol{\psi}_d^T = [{}^W \mathbf{r}_d^T, {}^W \boldsymbol{\epsilon}_d^T]^T$

The desired joint variable  $\mathbf{q}_{Ed} = [q_{1d}, \dots, q_{7d}]^T$  and  $\dot{\mathbf{q}}_{Ed}$  is obtained by

$$\mathbf{q}_{Ed} = \mathbf{f}^{-1}({}^W \boldsymbol{\psi}_d^T) \quad (11)$$

$$\dot{\mathbf{q}}_{Ed} = \mathbf{J}_E^+(\mathbf{q}) \begin{bmatrix} {}^W \dot{\mathbf{r}}_d \\ {}^W \boldsymbol{\omega}_d \end{bmatrix} \quad (12)$$

where  $\mathbf{f}^{-1}({}^W \boldsymbol{\psi}_d^T)$  is the inverse kinematic function and  $\mathbf{J}_E^+(\mathbf{q})$  is the pseudo-inverse matrix of  $\mathbf{J}_E(\mathbf{q})$ , and  $\mathbf{J}_E^+(\mathbf{q}) = \mathbf{J}_E^T(\mathbf{J}_E \mathbf{J}_E^T)^{-1}$ . In this report, we made  $q_1$

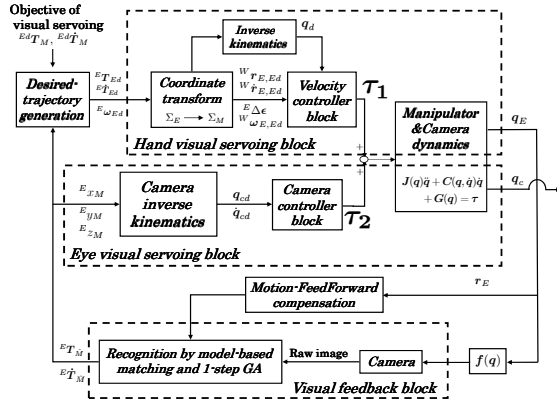


Fig. 8: Block diagram of the hand visual servoing system

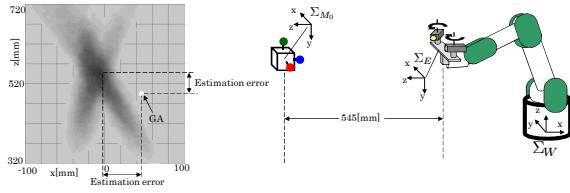


Fig. 9: The relation of the position of a target object and a hand(A target relation)

is 0, and used the inverse kinematics to calculate all joint angles. It can solve the redundancy problem. Meanwhile we took a controller to make the joint of angles approximately as the desired joint angles. So we defined the formula of the desired joint angles in the new controller as

$$\dot{q}_{Ed} = k_p(q_{Ed} - q_E) + J_E^+(q) \begin{bmatrix} W \dot{r}_d \\ W \omega_d \end{bmatrix} \quad (13)$$

where  $k_p$  is P positive gain.

The hardware control system of the velocity-based servo system of PA10 is expressed as

$$\tau = K_{SP}(q_d - q) + K_{SD}(\dot{q}_d - \dot{q}) \quad (14)$$

where  $K_{SP}$  and  $K_{SD}$  are symmetric positive definite matrices to determine PD gain.

### 3.2 Eye-vergence Visual Servoing Controller

The eye-vergence visual servoing is the inner loop of the visual servoing system shown in Fig. 8. In this paper, we use two pan-tilt cameras for eye-vergence visual servoing. Here, the positions of cameras are supposed to be fixed on the end-effector. For camera system,  $q_8$  is tilt angle,  $q_9$  and  $q_{10}$  are pan angles, and  $q_8$  is common for both cameras.

As it is shown in Fig. 4 (a) and (b),  ${}^E x_{\hat{M}}$ ,  ${}^E y_{\hat{M}}$ ,  ${}^E z_{\hat{M}}$  express position of the detected object in the end-effector coordinate. The desired angle of the camera joints are calculated by:

$$q_{8d} = \text{atan2}({}^E y_{\hat{M}}, {}^E z_{\hat{M}}) \quad (15)$$

$$q_{9d} = \text{atan2}(l_{8R} + {}^E x_{\hat{M}}, {}^E z_{\hat{M}}) \quad (16)$$

$$q_{10d} = \text{atan2}(l_{8L} + {}^E x_{\hat{M}}, {}^E z_{\hat{M}}) \quad (17)$$

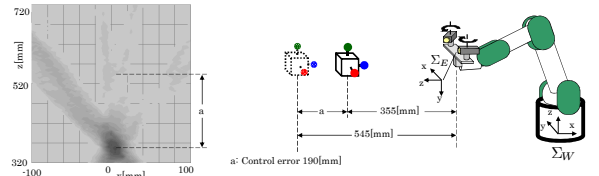


Fig. 10: The relation of the position of a target object and a hand(nearer than target relations)

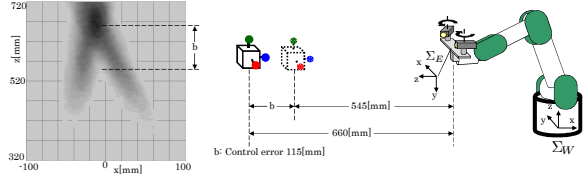


Fig. 11: The relation of the position of a target object and a hand(further than target relations)

where  $l_{8L} = l_{8R} = 120[mm]$  that is the camera location. The controller of eye-visual servoing is given by

$$\dot{q}_{8Cd} = K_P(q_{8d} - q_8) \quad (18)$$

$$\dot{q}_{9Cd} = K_P(q_{9d} - q_9) \quad (19)$$

$$\dot{q}_{10Cd} = K_P(q_{10d} - q_{10}) \quad (20)$$

where  $K_P$  are positive control gain.

Because the motion of camera motor is an open loop, we can only make it rotate a certain degree without getting the actual angle during the rotation, which make us cannot get the accurate camera angle. So the desired camera angles are input in every 33ms, and the input is limited to a certain value.

## 4 Experiment Of Hand Eye-Vergence Visual Servoing

### 4.1 Experimental system

To verify the effectiveness of the hand & eye visual servoing system through real robot, we used a robot, PA-10 robot arm that has a 7-DoF robot arm manufactured by Mitsubishi Heavy Industries. Two rotatable cameras mounted on the end-effector are FCB-1X11A manufactured by Sony Industries. The frame frequency of stereo cameras is set as 30fps. The image processing board, CT-3001, receiving the image from the CCD camera is connected to the DELL WORKSTATION PWS650 (CPU: Xeon, 2.00 GHz) host computer. The structure of the manipulator and the cameras are shown in Fig. 5 (a) and (b).

The 3D marker as used for the target object in the experiment composes a red ball, a green ball and a blue ball, whose dimension is shown in Fig. 6. The coordinate of the target object and the manipulator in experiment are shown in Fig. 7, the white arrow under the object express the move direction of it.

In order to check the visual servoing system, first, we did an experiment in which true object's,  $x$ ,  $y$ ,



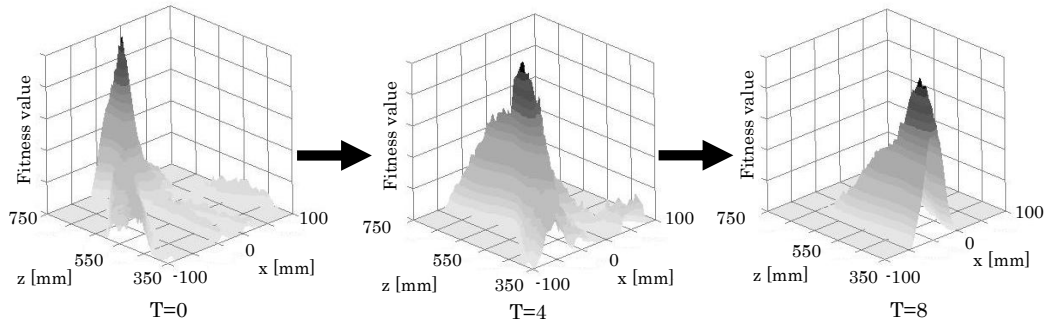


Fig. 12: Time transition of fitness value distribution

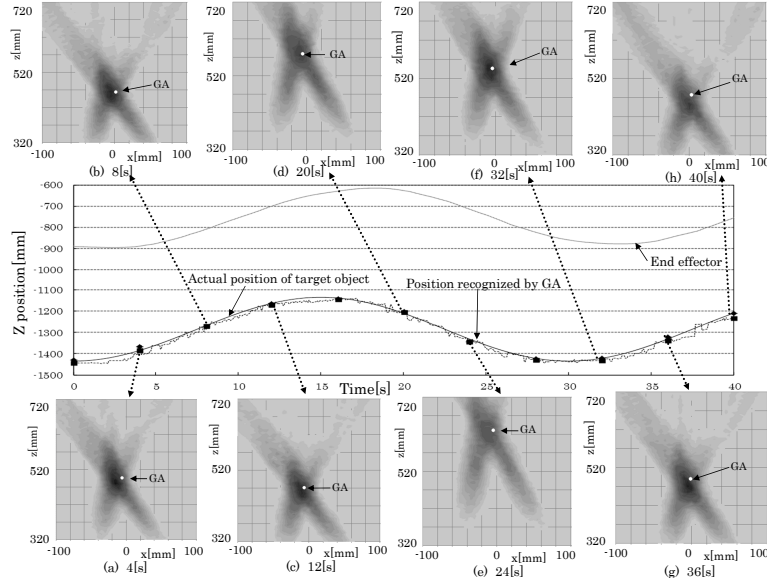


Fig. 13: Relation between  $z-x$  plane's fitness value, end-effector actual position of target object and position estimated by GA in  $\omega = 0.209$

$z$ ,  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$ ,  $\varepsilon_3$ , are assumed to be given to servoing controller. Then we did 3 groups of experiments of frequency response. In these experiments, we made 3-Dof position are recognized by the cameras respectively. For every group, we set  $\omega = 0.209$ , and  $\omega = 1.256$  separately, which are angular velocities of the object.

#### 4.2 Experiment condition

The initial hand pose is defined as  $\Sigma_{E_0}$ , and the initial object pose is defined as  $\Sigma_{M_0}$ . The homogeneous transformation matrix from  $\Sigma_W$  to  $\Sigma_{E_0}$  and from  $\Sigma_W$  to  $\Sigma_{M_0}$  are:

$${}^W T_{E_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 890[mm] \\ 1 & 0 & 0 & 0[mm] \\ 0 & 1 & 0 & 500[mm] \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (21)$$

$${}^W T_{M_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 1435[mm] \\ 1 & 0 & 0 & 0[mm] \\ 0 & 1 & 0 & 500[mm] \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (22)$$

The target object move according to the following time function

$$M_0 z_M(t) = 150 \quad 150 \cos(\omega t)[mm] \quad (23)$$

The relation between the object and the desired end-effector is set as:

$${}^{Ed} \psi_M = [0, \quad 90[mm], \quad 545[mm], \quad 0, \quad 0, \quad 0] \quad (24)$$

#### 4.3 Experiment Results

Fig. 9 shows the time varying fitness function distribution combined by both left and right camera is depicted, and the position of the white circle with a notation "GA" represents that the 1-step GA has found the indicated position represents most possible position.

There fore the deviation between the peak (target real position) and the GA's position means on-line tracking error of object in 3D space as shown in Fig. 9.

Fig. 10 depicts the situation that the object place nearer than prescribed desired position relation of the object and the hand, and Fig. 11 shown vice versa.

Fig. 12 shows a time transition of fitness value distribution. The GA discovers peaks of these fitness value in real time, and estimats the target object.

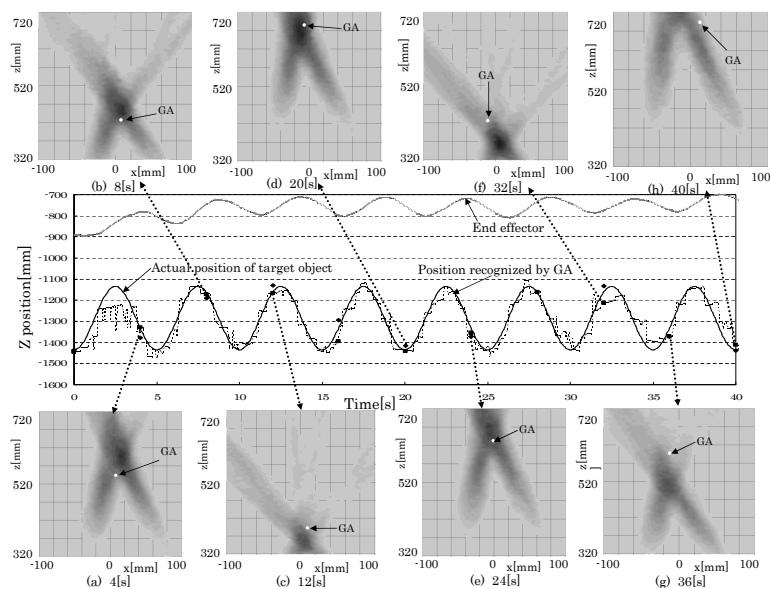


Fig. 14: Relation between  $z-x$  plane's fitness value, end-effector actual position of target object and position estimated by GA in  $\omega = 1.256$

In this experiment conditions, we have carried out some longitudinal frequency response experiments to moving object. We made x-position, 3-Dof position, and 6-Dof position and orientation are estimated by GA respectively, and take the results of 3-Dof position. From each of the results we can see that the eye-vergence system has smaller delay phase which means it will observe the object better. Then we have carried out a full search of the fitness value in each case with eye-vergence visual servoing. I show the relationship between the GA genes and the object position and orientation by writing the results of the GA obtained from a full search in Fig. 13, 14.

Fig. 13 and Fig. 14 show the data of the position of the end-effector, the position estimated by GA and the actual position of target object. And the eight graphs in these figures mean the result of the fitness values obtained from a full search every 4 seconds intervals, whose peak of fitness value distribution represents the target object's real position in 3D space. The white circles represent the GA genes. Therefore the position difference between the fitness peak (real target's position) and GA's detected position (detected position by 1-step GA) represents tracking error of target motion by 1-step GA. The cycles of the target object motion is  $\omega = 0.209$  and  $\omega = 1.256$  respectively.

In the Fig. 13 the GA can estimate the target object and can track without delaying because the target object motion is slow. In the Fig. 14 the GA can estimate target object and track, but the PA-10 can not track the target object. Because the moment of inertia of camera is smaller than PA-10's, which is a characteristic of eye-vergence system.

## 5 CONCLUSION

In this paper, we have carried out some longitudinal frequency response experiments to evaluate the observation and tracking ability on a moving object of visual servoing system. Also, we have carried out a full search of the fitness value in each case with eye-vergence visual servoing. From the experiment results, we can draw a conclusion that the object moving in camera-depth direction can be recognised and 1-step GA can discover peaks of fitness value in real-time, meaning the 1-step GA can track the target in real-time. And we grasp the real-time estimate tracking error by revealing the relationship between the GA and the target object that was searched in Hand-eye-vergence system.

## References

- 1) S.Hutchinson, G.Hager, and P.Corke, "A Tutorial on Visual Servo Control", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 12, no. 5, pp. 651-670, 1996.
- 2) P.Y.Oh, and P.K.Allen, "Visual Servoing by Partitioning Degrees of Freedom", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 17, no. 1, pp. 1-17, 2001.
- 3) E.Malis, F.Chaumette and S.Boudet, "2-1/2-D Visual Servoing", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 15, no. 2, pp. 238-250, 1999.
- 4) P.K.Allen, A.Timchenko, B.Yoshimi, and P.Michelman, "Automated Tracking and Grasping of a Moving object with a Robotic Hand-Eye System", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 9, no. 2, pp. 152-165, 1993.
- 5) Wolfgang Sepp, Stefan Fuchs and Gerd Hirzinger, "Hierarchical Featureless Tracking for Position-Based 6-DoF Visual Servoing", Proceedings of the 2006 IEEE/RSJ Int. Conf. on Intelligent Robotics and Systems (IROS), pp.4310-4315, 2006.
- 6) Toshifumi Hiramatsu, Takanori Fukao, Keita Kurashiki, Koichi Osuka "Image-based Path Following Control of Mobile Robots with Central Catadioptric Cameras" IEEE International Conference on Robotics and Automation Kobe, Japan, May 12-17, 2009

- 7) Omar Tahri, Youcef Mezouar “Generic Decoupled Image-Based Visual Servoing for Cameras Obeying the Unified Projection Model” IEEE International Conference on Robotics and Automation Kobe, Japan, May 12-17, 2009
- 8) W. Song, M. Minami, Y. Mae and S. Aoyagi, “ On-line Evolutionary Head Pose Measurement by Feedforward Stereo Model Matching ”, IEEE Int. Conf. on Robotics and Automation (ICRA), pp.4394-4400, 2007.
- 9) Omar Tahri and Francois Chaumette, “Point-Based and Region-Based Image Moments for Visual Servoing of Planar Objects”, IEEE Tran. on Robotics, vol. 21, no. 6, Dec 2005.
- 10) Tarek Hamel and Robert Mahony, “Visual Servoing of an Under-Actuated Dynamic Rigid-Body System: An Image-Based Approach”, IEEE Trans. on Robotics and Automation, VOL. 18, NO. 2, APRIL 2002.
- 11) M.Minami, H.Suzuki, J.Agbanhan, T.Asakura:”Visual Servoing to Fish and Catching Using Global/Local GA Search”, 2001 IEEE/ASME Int. Conf. on Advanced Intelligent Mechatronics Proc., pp.183-188, 2001.
- 12) W. Song, M. Minami, S. Aoyagi, “On-line Stable Evolutionary Recognition Based on Unit Quaternion Representation by Motion-Feedforward Compensation”, International Journal of Intelligent Computing in Medical Sciences and Image Processing (IC-MED) Vol. 2, No. 2, Page 127-139 (2007).
- 13) T.Nagata, K.Konishi and H.Zha: ”Cooperative manipulations based on Genetic Algorithms using contact information”, Proceedings of the International Conference on Intelligent Robots and Systems, pp.400-5, 1995

# ヒューマノイドの二足歩行時の動的形状変更可操作性

○馮 陶然 小林 洋祐 見浪 護 矢納 陽 (岡山大学)

## Dynamic Reconfiguration Manipulability of Bipedal Humanoid Walking

T. Feng Y. Kobayashi M. Minami and A. Yanou (Okayama University)

**Abstract**— In this paper, we propose a new index inspired by dynamic manipulability for redundant robot proposed by Yoshikawa in order to estimate dynamic ability to change configuration by using remaining redundancy, while prior task is controlled, for example, end-effectors being controlled to a desired trajectory in task space. Several indexes have been proposed so far to measure statical and dynamical capability of robot manipulator. For example, Dynamic Manipulability Ellipsoid (DME) describes a distribution of joint 's acceleration produced by normalized joint torque. Besides, Reconfiguration Manipulability Ellipsoid (RME) denotes a distribution of each joint 's velocity produced by joint angular velocity. In this paper, we proposed a new concept named Dynamic Reconfiguration Manipulability (DRM) which combined dynamic manipulability with reconfiguration manipulability, and applied the DRM to verify its usability to humanoid robot walking on uneven ground.

**Key Words:** Dynamic Reconfiguration Manipulability, Humanoid Robot, Shape-changeability.

## 1 Introduction

For walking control of humanoid, ZMP-based walking is known as the most convincing approach, which has been proved to be a realistic control strategy to demonstrate stable walking of actual bipedal robots, since it can guarantee that the robots can keep standing by retaining the ZMP in the supporting area of convex hull<sup>1), 2)</sup>. In addition to the ZMP, another approaches which put importance on keeping the robot's walking trajectories inside a basin of attraction<sup>3)-5)</sup> include a method referring limit cycle to determine input torque<sup>6)</sup>.

These previous researches are based on simplified bipedal models, which tend to avoid discussing the effects of feet or slipping existing in real world. Contrarily to the above references, a research<sup>7)</sup> has pointed out that the effect of foot bears varieties of the walking gait, which dimension of the equation of motion varies according to contacting conditions to floor of feet standing or in the air. Our research has begun from such view point of<sup>7)</sup> as aiming at describing dynamics of gait as correctly as possible, including surface or point-contacting state of foot and toe, slipping of the foot and heel-striking, where walking gait states based on the results of walking motions, called event-driven. And what the authors think important is that the dimension of dynamical equation will change depending on motions of the walking gait (event-driven results), which has been discussed by<sup>8)</sup> on one-legged hopping robot.

To achieve a stable walking since humanoid robot will turn over when the point of ZMP is in the toe of feet, we proposed "Visual Lifting Approach" strategy<sup>9)</sup> and have confirmed that it can confine unstable toe-off state in a stable limit cycle, making the closed-loop walking dynamics stable. Humans can change whole configuration-height or horizontal trajectory of waist avoid obstacles while walking and gazing at something existing ahead. The humans' behavior utilizes redundancy as a result of primary task of walking and gazing. Therefore we want to discuss

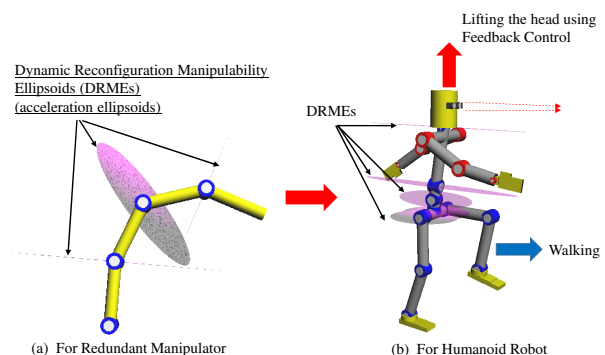


Fig. 1: Applications of Dynamic Reconfiguration Manipulability

about dynamical redundancy of humanoid robot in this paper, proposing a dynamical reconfiguration manipulability (DRM) concept, which is a measure of how much a dynamical system can potentially produce a motion in a work space with normalized input torque, by combining the Dynamic Manipulability (DM)<sup>10)</sup> with Reconfiguration Manipulability (RM)<sup>11)</sup>. This new measure represents how much the dynamical system of robots possess shape-reconfiguration acceleration ability in workspace by unit torque input for all joints while executing primary tasks. The DRM has been applied to humanoid robot, whose prior task is allocated to sustain head position to be as high as possible. The concept is shown in Fig. 1(b) and the DRM of floor-fixed four link robot which was published in<sup>12)</sup> is shown in Fig. 1(a). In this paper, we would utilize the DRM to bipedal humanoid robot walking on uneven ground, and verify humanoid robot's shape-changeability and the leeway of tolerance of feet to uneven ground.

## 2 Dynamic Reconfiguration Manipulability

### 2.1 Dynamic Manipulability

In general, equation of dynamics for serial link manipulators is written as

$$M(q)\ddot{q} + h(q, \dot{q}) + g(q) + D\dot{q} = \tau \quad (1)$$

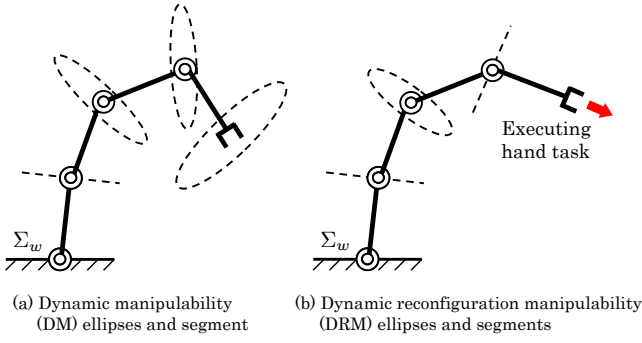


Fig. 2: (a) Dynamic manipulability ellipsoids (DMEs) represent the possible accelerations for each link with no prior task and (b) dynamic reconfiguration manipulability ellipsoids (DRMEs) represent the possible accelerations for intermediate links during the system executing primary task.

where  $M(\mathbf{q}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$  is inertia matrix,  $\mathbf{h}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) \in \mathbb{R}^n$  and  $\mathbf{g}(\mathbf{q}) \in \mathbb{R}^n$  are vectors which indicate Coriolis force, centrifugal force and gravity,  $\mathbf{D} = \text{diag}[d_1, d_2, \dots, d_n]$  is matrix which means coefficients of joints' viscous friction and  $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^n$  is joint torque. The kinematic equation of a robot, that the relation between the  $i$ -th link's velocity  $\dot{\mathbf{r}}_i \in \mathbb{R}^m$  and the angular velocity  $\dot{\mathbf{q}} \in \mathbb{R}^n$  is represented by

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{J}_i \dot{\mathbf{q}} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (2)$$

Here,  $\mathbf{J}_i \in \mathbb{R}^{m \times n}$  can be described as Jacobian matrix with zero block matrix,  $\mathbf{J}_i = [\tilde{\mathbf{J}}_i, \mathbf{0}]$ . By differentiating Eq. (2), we can obtain the following equation.

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{J}_i(\mathbf{q})\ddot{\mathbf{q}} + \dot{\mathbf{J}}_i(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}} \quad (3)$$

where we can understand that  $\dot{\mathbf{J}}_i(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}}$  is the acceleration as Coliolis and centrifugal acceleration resulted from non-linear relation of two-coordinates-space represented by  $\mathbf{q}_i$  to  $\mathbf{r}_i$ . Then, from Eqs. (1) and (3) we can obtain the following equation.

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \dot{\mathbf{J}}_i(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{J}_i M^{-1}[\boldsymbol{\tau} - \mathbf{h}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - \mathbf{g}(\mathbf{q}) - \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}}] \quad (4)$$

Here, two variables are defined as follows:

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} \triangleq \boldsymbol{\tau} - \mathbf{h}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - \mathbf{g}(\mathbf{q}) - \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}} \quad (5)$$

$$\ddot{\mathbf{r}}_i \triangleq \ddot{\mathbf{r}}_i - \dot{\mathbf{J}}_i(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{J}_i(\mathbf{q})\ddot{\mathbf{q}} \quad (6)$$

So, Eq. (4) can be rewritten as

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{J}_i M^{-1} \tilde{\boldsymbol{\tau}} \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (7)$$

Considering desired accelerations  $\ddot{\mathbf{r}}_{id}$  of all links yielded by a set of joint torques  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$  which satisfies an Euclidean norm condition, that is,  $\|\tilde{\boldsymbol{\tau}}\| = (\tilde{\tau}_1^2 + \tilde{\tau}_2^2 + \dots + \tilde{\tau}_n^2)^{1/2} \leq 1$ , each tip acceleration shapes an ellipsoid in range space of  $\mathbf{J}_i$ . These ellipsoids of each link have been known as "Dynamic Manipulability Ellipsoid (DME)"<sup>10)</sup> (Fig.2(a)) which are described as

$$\ddot{\mathbf{r}}_{id}^T [\mathbf{J}_i (M^T M)^{-1} \mathbf{J}_i^T]^+ \ddot{\mathbf{r}}_{id} \leq 1, \text{ and } \ddot{\mathbf{r}}_{id} \in \mathbf{R}(\mathbf{J}_i) \quad (8)$$

where,  $\mathbf{R}(\mathbf{J}_i)$  represents range space of  $\mathbf{J}_i$ .

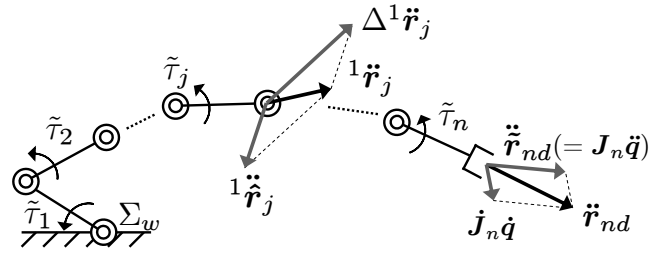


Fig. 3: Reconfiguration at intermediate link during hand task executed

## 2.2 Dynamic Reconfiguration Manipulability

Here we assume that the desired end-effector's acceleration  $\ddot{\mathbf{r}}_{nd}$  is given as primary task. The relation between  $\ddot{\mathbf{r}}_n$  and  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$  is denoted to change  $i$  to  $n$  from Eq. (7), then,

$$\ddot{\mathbf{r}}_n = \mathbf{J}_n M^{-1} \tilde{\boldsymbol{\tau}} \quad (9)$$

Solving Eq. (9) for  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$  yielding desired acceleration  $\ddot{\mathbf{r}}_{nd}$

$$\tilde{\boldsymbol{\tau}} = (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ \ddot{\mathbf{r}}_{nd} + [\mathbf{I}_n - (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ (\mathbf{J}_n M^{-1})] \mathbf{l} \quad (10)$$

$\mathbf{l}$  is an arbitrary vector satisfying  $\mathbf{l} \in \mathbb{R}^n$ . The left superscript "1" of  $\mathbf{l}$  means the first dynamic reconfiguration task. In the right side of Eq. (10), the first term denotes the solution making  $\tilde{\boldsymbol{\tau}}$  minimize in the null space of  $\mathbf{J}_n M^{-1}$  during implementing  $\ddot{\mathbf{r}}_{nd}$ . The second term denotes the components of torques at each joint, which can change the shape of manipulator regardless with the influence of  $\ddot{\mathbf{r}}_{nd}$  given arbitrarily as end-effector acceleration for tracking the desired trajectory. Providing the first dynamic reconfiguration task, that is the first reconfiguration task  ${}^1\ddot{\mathbf{r}}_{jd}$  ( $j = 1, 2, \dots, n-1$ ), is given to the  $j$ -th link, shall we discuss realizability of  ${}^1\ddot{\mathbf{r}}_{jd}$  in the following argument. In this research,  ${}^1\ddot{\mathbf{r}}_{jd}$  is assumed to be commanded by an dynamic reconfiguration control system of higher level. We can obtain the relation of  ${}^1\ddot{\mathbf{r}}_j$  and  $\ddot{\mathbf{r}}_{nd}$  from Eqs. (7) and (10).

$${}^1\ddot{\mathbf{r}}_j = \mathbf{J}_j M^{-1} (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ \ddot{\mathbf{r}}_{nd} + \mathbf{J}_j M^{-1} [\mathbf{I}_n - (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ (\mathbf{J}_n M^{-1})] \mathbf{l} \quad (11)$$

Then, according to the relation of Eq. (6),

$${}^1\ddot{\mathbf{r}}_j = \dot{\mathbf{J}}_j \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{J}_j M^{-1} (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ (\ddot{\mathbf{r}}_{nd} - \dot{\mathbf{J}}_n \dot{\mathbf{q}}) + \mathbf{J}_j M^{-1} [\mathbf{I}_n - (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ (\mathbf{J}_n M^{-1})] \mathbf{l} \quad (12)$$

Here, we define three variables shown as

$${}^1\tilde{\mathbf{r}}_j \triangleq \dot{\mathbf{J}}_j \dot{\mathbf{q}} + \mathbf{J}_j M^{-1} (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ (\ddot{\mathbf{r}}_{nd} - \dot{\mathbf{J}}_n \dot{\mathbf{q}}) \quad (13)$$

$$\Delta {}^1\tilde{\mathbf{r}}_j \triangleq \mathbf{J}_j M^{-1} (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ \ddot{\mathbf{r}}_{nd} \quad (14)$$

$${}^1\boldsymbol{\Lambda}_j \triangleq \mathbf{J}_j M^{-1} [\mathbf{I}_n - (\mathbf{J}_n M^{-1})^+ (\mathbf{J}_n M^{-1})] \quad (15)$$

In Eq. (13),  ${}^1\tilde{\mathbf{r}}_j$  is represented for the acceleration caused by manipulator's shape-changing. In the right side of Eq. (13), the first term is denoted as the Coliolis and centrifugal acceleration of  $j$ -th link, and the second term is represented for the influence of  $\ddot{\mathbf{r}}_{nd}$  on  $j$ -th link except Coliolis and centrifugal acceleration at  $n$ -th link because its

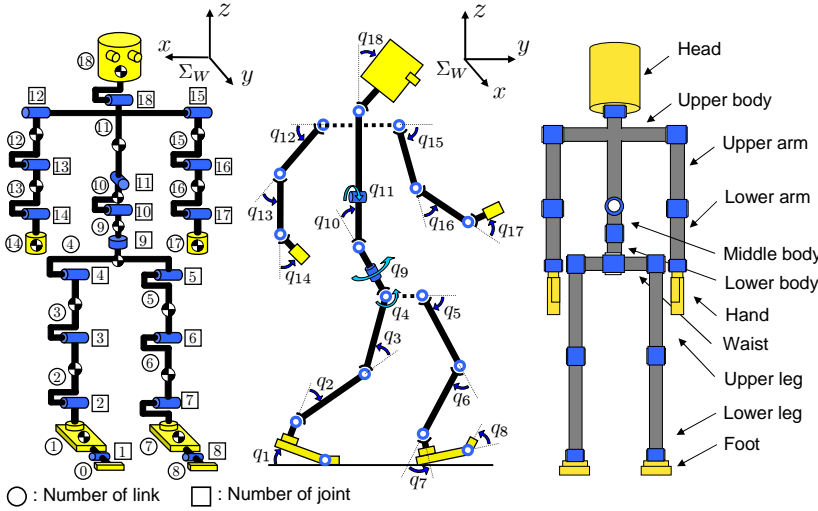


Fig. 4: Definition of humanoid's link, joint and angle number

acceleration is peculiar on its coordinate frame. So, Eq. (12) can be rewritten as

$$\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_j = {}^1 \Lambda_j {}^1 \mathbf{l} \quad (16)$$

The relation between  ${}^1 \ddot{\mathbf{r}}_j$  and  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_j$  is shown in Fig. 3. However, the problem is whether we can yield desired  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}$ , that is, whether we can find  ${}^1 \mathbf{l}$  to generate  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}$ . From Eq. (16), we can obtain  ${}^1 \mathbf{l}$  as

$${}^1 \mathbf{l} = {}^1 \Lambda_j^+ \Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd} + (\mathbf{I}_n - {}^1 \Lambda_j^+ {}^1 \Lambda_j) {}^2 \mathbf{l} \quad (17)$$

In Eq. (17),  ${}^2 \mathbf{l}$  is an arbitrary vector satisfying  ${}^2 \mathbf{l} \in \mathbb{R}^n$ . Assuming that  ${}^1 \mathbf{l}$  is restricted as  $\|{}^1 \mathbf{l}\| \leq 1$ , then we obtain next relation,

$$(\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd})^T ({}^1 \Lambda_j^+)^T {}^1 \Lambda_j^+ \Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd} \leq 1 \quad (18)$$

If  $\text{rank}({}^1 \Lambda_j) = m$ , Eq. (18) represents an ellipsoid expanding in  $m$ -dimensional space, holding

$$\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd} = {}^1 \Lambda_j {}^1 \Lambda_j^+ \Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}, \quad \Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd} \in \mathbb{R}^m, \quad (19)$$

which indicates that  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}$  can be arbitrarily generated in  $m$ -dimensional space and Eq. (16) always has the solution  ${}^1 \mathbf{l}$  corresponding to all  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd} \in \mathbb{R}^m$ . On the other hand, if  $\text{rank}({}^1 \Lambda_j) = r < m$ ,  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}$  does not value arbitrarily in  $\mathbb{R}^m$ . In this case, reduced  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}$  is denoted as  $\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}^*$ . Then Eq. (18) is written as

$$\begin{aligned} (\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}^*)^T ({}^1 \Lambda_j^+)^T {}^1 \Lambda_j^+ \Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}^* &\leq 1 \\ (\Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}^* = {}^1 \Lambda_j {}^1 \Lambda_j^+ \Delta^1 \ddot{\mathbf{r}}_{jd}) & \end{aligned} \quad (20)$$

Equation (20) describes an ellipsoid expanded in  $r$ -dimensional space. These ellipsoids of Eqs. (18) and (20) are shown in Fig.2(b).

### 2.3 Dynamic Reconfiguration Manipulability Shape Index(DRMSI)

In this section, we propose the index evaluating DRM. Thus, by applying the singular value decomposition for this matrix  $\Lambda$ , we get

$${}^1 \Lambda_j = {}^1 \mathbf{U}_j {}^1 \Sigma_j^1 {}^1 \mathbf{V}_j^T \quad (21)$$

Table 1: Physical parameters

Link	$l_i$	$m_i$	$d_i$
Head	0.24	4.5	0.5
Upper body	0.41	21.5	10.0
Middle body	0.1	2.0	10.0
Lower body	0.1	2.0	10.0
Upper arm	0.31	2.3	0.03
Lower arm	0.24	1.4	1.0
Hand	0.18	0.4	2.0
Waist	0.27	2.0	10.0
Upper leg	0.38	7.3	10.0
Lower leg	0.40	3.4	10.0
Foot	0.07	1.1	10.0
Total	1.7	63.8	

$${}^1 \Sigma_j = \begin{matrix} & r & & n & r \\ \begin{matrix} r \\ m \end{matrix} & \begin{bmatrix} {}^1 \sigma_{j,1} & & \mathbf{0} \\ & \ddots & \\ \mathbf{0} & & {}^1 \sigma_{j,r} \\ & & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} & \end{matrix} \quad (22)$$

In Eqs. (21) and (22),  ${}^1 \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ,  ${}^1 \mathbf{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  are orthogonal matrixes, and  $r$  denotes the number of non-zero singular values of  ${}^1 \Lambda_j$  and  $\sigma_{j,1} \dots \sigma_{j,r} > 0$ . In addition,  $r \leq m$  because  $\text{rank}({}^1 \Lambda_j) \leq m$ . So, dynamic reconfiguration capability of  $j$ -th link when hand of manipulator operating task can be described by following equation.

$${}^1 w_j = {}^1 \sigma_{j,1} \quad {}^1 \sigma_{j,2} \quad \dots \quad {}^1 \sigma_{j,r} \quad (23)$$

In this paper, we defined the value of  $w_j$  in Eq. (23) as dynamic reconfiguration manipulability measure (DRMM), which indicates the degree of that reconfiguration acceleration of  $j$ -th link can be generated for arbitrary direction. And, volume of dynamic reconfiguration ellipsoid at the  $j$ -th link is described as  ${}^1 V_{DRj}$ , which is given as follows:

$${}^1 V_{DRj} = c_r \quad {}^1 w_j \quad (24)$$

$$c_r = \begin{cases} 2(2\pi)^{(r-1)/2} / [1 \quad 3 \quad (r-2)r] & (r : \text{odd}) \\ (2\pi)^{r/2} / [2 \quad 4 \quad (r-2)r] & (r : \text{even}) \end{cases} \quad (25)$$

Then, in order to consider dynamic reconfiguration measure of the whole manipulator-links, we define a index named dynamic reconfiguration manipulability shape index (DRMSI) as follows:

$${}^1 W_{DR} = \sum_{j=1}^{n-1} a_j \quad {}^1 V_{DRj} \quad (26)$$

Here,  $a_j$  is unit adjustment between different dimension. In this paper, singular-values increase a hundredfold to enlarge value of ellipsoid, compared to ellipse or line segment.

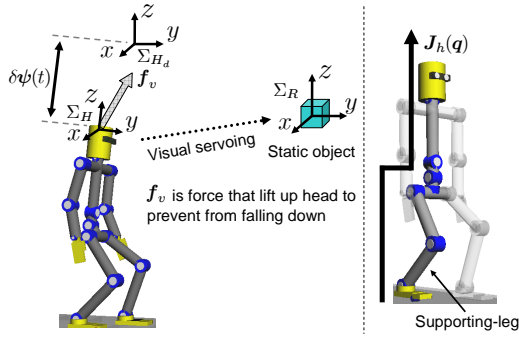


Fig. 5: Concept of Visual Lifting Approach

### 3 Dynamical Walking Model

We discuss a biped robot whose definition is depicted in Fig.4. Table1 indicates length  $l_i$  [m], mass  $m_i$  [kg] of links and joints' coefficient of viscous friction  $d_i$  [N m s/rad], which are decided based on <sup>13)</sup>. Our model represents rigid whole body—feet including toe, torso, arms and body—having 18 degree-of-freedom. Detail explanation of this model is omitted, which is described in <sup>14)</sup>.

### 4 Visual Lifting Approach

#### 4.1 Feedback lifting torque generator

This section presents a vision-feedback control for improving humanoid's standing/walking stability <sup>9)</sup> as shown in Fig. 5. Here, the force exerted on the head to minimize  $\delta\psi(t) = \psi_d(t) - \psi(t)$  calculated from measured position or pose, we assume this parameter as being detected correctly in this paper. The joint torque  $\tau_h(t)$  that pulls the robot's head up is given the following equation:

$$\tau_h(t) = J_h(q)^T K_p \delta\psi(t), \quad (27)$$

where  $J_h(q)$  in Fig.5 is Jacobian matrix of the head pose against joint angles including  $q_1, q_2, q_3, q_4, q_9, q_{10}, q_{11}, q_{18}$ , and  $K_p$  means proportional gain similar to impedance control. We use this input to compensate the falling motions caused by gravity or dangerous slipping motion happened unpredictably during all walking states.

#### 4.2 Feed-forward leg and body motion generator

In addition to  $\tau_h(t)$ , we used two input torques:  $\tau_t(t) = [0, 0, 0, \tau_{t5}, 0, 0]^T$  to make floating-leg (joint-5) step forward and  $\tau_w(t) = [0, 0, 0, \tau_{w11}, 0, 0]^T$  to swing waist's roll angle (joint-11) according to supporting-foot. The element  $\tau_{t5}$  and  $\tau_{w11}$  of  $\tau_t(t)$  and  $\tau_w(t)$  are settled by approximate human's walking-cycle as below:

$$\tau_{t5} = 20 \cos \{2\pi(t - t_1)/1.85\} \quad (28)$$

$$\tau_{w11} = \begin{cases} 50 \sin \{2\pi(t - t_1)/1.85\} & (if \text{ Right leg}) \\ -50 \sin \{2\pi(t - t_1)/1.85\} & (if \text{ Left leg}). \end{cases} \quad (29)$$

Here,  $t_1$  means the time that supporting-foot and contacting-foot are switched.

#### 4.3 Combined lifting/swinging controller

Combining three torque generators expressed as Eqs. (27), (28) and (29), a controller for walking is created as  $\tau(t) = \tau_h(t) + \tau_t(t) + \tau_w(t)$ .

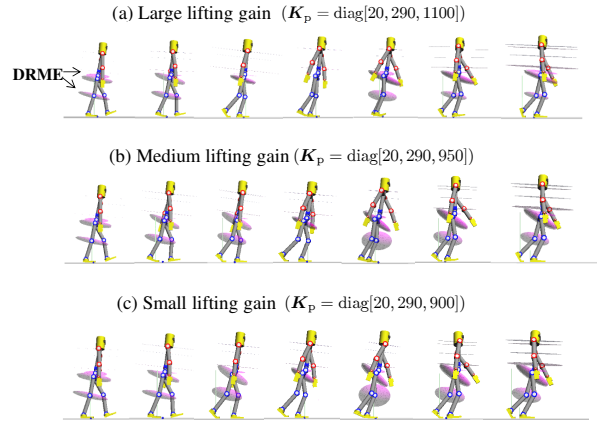


Fig. 6: Screen-shot of bipedal walking with DRM ellipsoids

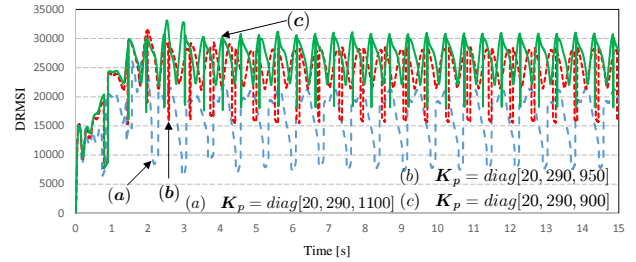


Fig. 7: DRMSI until  $t = 15.0[s]$

## 5 Simulations

### 5.1 Analyses based on Dynamic Reconfiguration Manipulability

In this section, three kinds of lifting-proportional-gain are set to be  $K_p = \text{diag}[20, 290, 1100]$  (Large lifting-gain),  $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$  (Medium lifting-gain) and  $K_p = \text{diag}[20, 290, 900]$  (Small lifting-gain) to compare walkings by DRM. The humanoid walked as shown Fig. 6(a), (b) and (c), respectively (scaling ellipsoids). Then, there are no DRM ellipsoids (existing line segments) at knee of (a)-4, (b)-4 and (c)-4, since supporting-foot is surface-contacting, that is, joint angles  $q = [q_2, q_3, \dots, q_{18}]^T$ . On the other hand, there are DRM ellipsoids (ellipses) at knee of the other phases, since supporting-foot is point-contacting, that is, joint angles  $q = [q_1, q_2, \dots, q_{18}]^T$ . In Fig. 6, the heights of waist of (c) are lower than that of (a). Furthermore, DRM ellipsoids volumes of (c) are larger than that of (a). In Figs. 7, as lifting gain larger, DRMSI representing whole volumes of DRM ellipsoids is smaller. This means walking of (c) has higher shape-changeability than (a), but it seems that walking of (b) and (c) are far from human's walking, so, we called them monkey-like walking.

### 5.2 A comparison between two gains based on Dynamic Reconfiguration Manipulability when walking on uneven ground

In this simulation, in order to seek the variety of Dynamic Reconfiguration Changeability according to the height of steps on uneven ground, we set the trajectory of ground like Fig.8, and we set the height of steps  $\delta h = 0.01[m], 0.02[m], 0.03[m]$  etc. And then, we set lifting-gains of feedback control equation  $K_{pz}$  to two kinds of

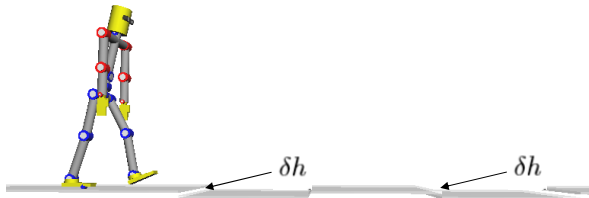


Fig. 8: The uneven ground

values, these are  $K_{pz} = 1100$  (human-like walking) and  $K_{pz} = 950$  (monkey-like walking), to find which has a higher adapting capability to uneven ground.

In the case of  $K_{pz} = 1100$ , we can see from Fig.9 to Fig.12 that the larger the height of step becomes, the lower the Dynamic Reconfiguration Changeability is when the foot reaches the first step. And, when the height of each step turns to  $0.04[m]$ , humanoid robot will fall down when reaches the first step.

From Fig.13 to Fig.18, we can see that in the case of  $K_{pz} = 950$ , the DRMSIs that indicate the Dynamic Reconfiguration Changeability are higher than the case of high lifting-gain's in the whole areas. Besides, we can also know that the larger the height of step becomes, the lower the Dynamic Reconfiguration Changeability is when the foot reaches the first step. And when the height of each step turns to  $0.06[m]$ , humanoid robot will fall down when reaches the first step. For these reasons, we can say that the larger the height of each step becomes, the lower the changeability is when supporting foot turns to contacting foot. What's more, we can know that the leeway of tolerance to uneven ground of monkey-like walking ( $K_{pz} = 950$ ) is much better than that of human-like walking ( $K_{pz} = 1100$ ).

## 6 Conclusion

In this paper, we proposed an index of Dynamic Reconfiguration Manipulability which indicates robot's dynamic shape-changeability, and applied it into humanoid robot to verify its usability to humanoid robot walking on uneven ground. To humanoid's walking, we introduced Visual Lifting Approach into humanoid walking, which can keep humanoid robot's posture stable and guarantee it walking smoothly, and added input torques to arms so that it can walk much more authentic. Through simulations, we can realize that, the humanoid walking with the shape of monkey-like ( $K_{pz} = 950$  and ( $K_{pz} = 900$ )) has higher dynamic shape-changeability than that of human-like ( $K_{pz} = 1100$ ). And the leeway of tolerance to uneven ground of monkey-like walking is much better than that of human-like walking.

## References

- 1) M. Vukobratovic, A. Frank and D. Juricic, "On the Stability of Biped Locomotion," *IEEE Transactions on Biomedical Engineering*, Vol. 17, No. 1, 1970.
- 2) M. Vukobratovic and J. Stepanenko, "On the Stability of Anthropomorphic Systems," *Mathematical Biosciences*, Vol. 15, pp. 1–37, 1972.
- 3) S. Colins, A. Ruina, R. Tedrake and M. Wisse, "Efficient Bipedal Robots Based on Passive-Dynamic Walkers," *Science*, Vol. 307, pp. 1082–1085, 2005.
- 4) J. Pratt, P. Dilworth and G. Pratt, "Virtual Model Control of a Bipedal Walking Robot," *Proceedings of IEEE International Conference on Robotics and Automation*, pp. 193–198, 1997.
- 5) R.E. Westervelt, W.J. Grizzle and E.D. Koditschek, "Hybrid Zero Dynamics of Planar Biped Walkers," *IEEE Transactions on Automatic Control*, Vol. 48, No. 1, pp. 42–56, 2003.
- 6) Y. Harada, J. Takahashi, D. Nenchev and D. Sato, "Limit Cycle Based Walk of a Powered 7DOF 3D Biped with Flat Feet," *Proceedings of IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems*, pp. 3623–3628, 2010.
- 7) Y. Huang, B. Chen, Q. Wang, K. Wei and L. Wang, "Energetic efficiency and stability of dynamic bipedal walking gaits with different step lengths," *Proceedings of IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems*, pp. 4077–4082, 2010.
- 8) T. Wu, T. Yeh and B. Hsu, "Trajectory Planning of a One-Legged Robot Performing Stable Hop," *Proceedings of IEEE/RSJ International Conference on Intelligent Robots and Systems*, pp. 4922–4927, 2010.
- 9) W. Song, M. Minami, F. Yu, Y. Zhang, "A Visual Lifting Approach for Dynamic Bipedal Walking," *International Journal of Advanced Robotic Systems*, Vol. 9, ISBN: 1729–8806, 2012.
- 10) T. Yoshikawa, "Dynamic Manipulability of Robot Manipulators," *Proceedings of the IEEE International Conference on Robotics and Automation*, Vol. 2, No. 1, pp. 113–124, 1985.
- 11) M. Minami, Y. Nomura and T. Asakura, "Avoidance Manipulability for Redundant Manipulators," *Journal of the Robotics Society of Japan*, Vol. 17, No. 6, pp. 887–895, 1999 (in Japanese).
- 12) T. Feng, Y. Kobayashi, M. Minami, A. Yanou, "Dynamic Reconfiguration Manipulability Analysis of Redundant Robot," *IEEE International Conference on Mechatronics and Automation (ICMA)*, pp.51–56, 2013.
- 13) M. Kouchi, M. Mochimaru, H. Iwasawa and S. Mitani, "Anthropometric database for Japanese Population 1997–98," Japanese Industrial Standards Center (AIST, MITI), 2000.
- 14) T. Maeba, M. Minami, A. Yanou, J. Nishiguchi, "Dynamical Analyses of Humanoid's Walking by Visual Lifting Stabilization Based in Event-driven State Transition Cooperative manipulations based on Genetic Algorithms using contact information," *2012 IEEE/ASME Int. Conf. on Advanced Intelligent Mechatronics Proc.*, pp. 7–14, 2012.



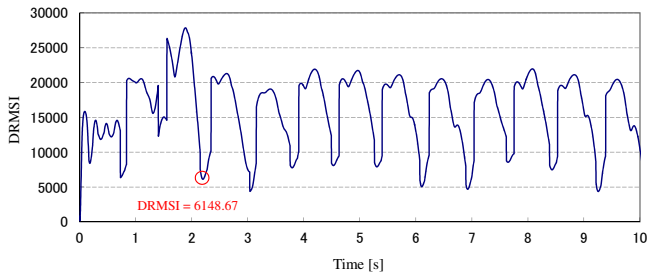


Fig. 9: Case: High lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 1100]$ ),  $\delta h = 0.01[m]$

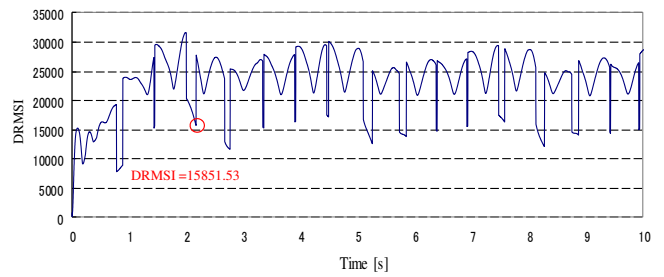


Fig. 14: Case: Low lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$ ),  $\delta h = 0.02[m]$

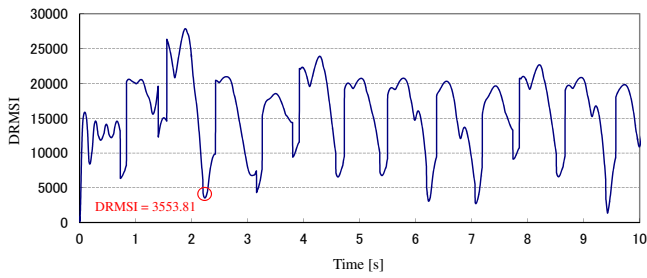


Fig. 10: Case: High lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 1100]$ ),  $\delta h = 0.02[m]$

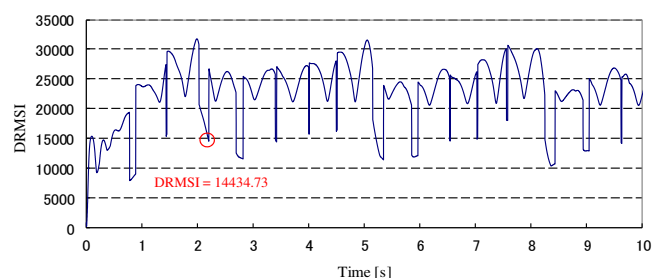


Fig. 15: Case: Low lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$ ),  $\delta h = 0.03[m]$

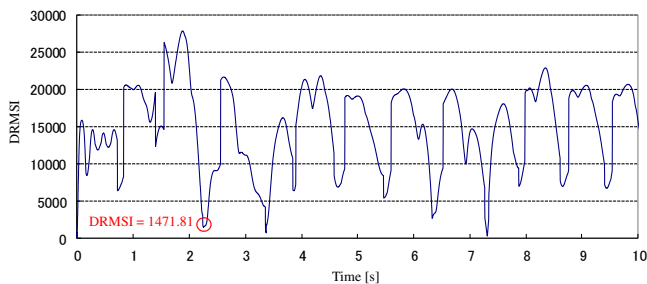


Fig. 11: Case: High lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 1100]$ ),  $\delta h = 0.03[m]$

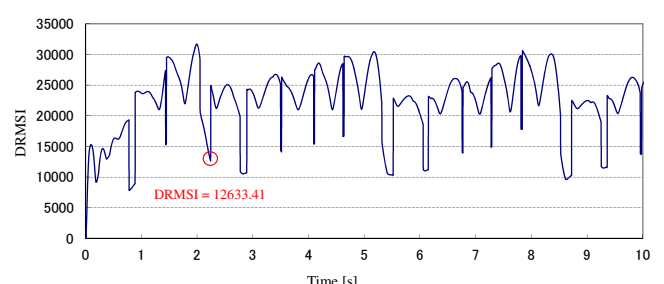


Fig. 16: Case: Low lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$ ),  $\delta h = 0.04[m]$

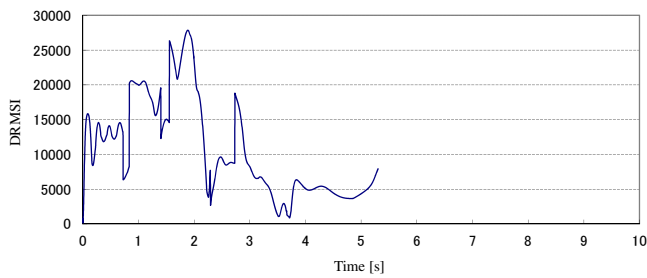


Fig. 12: Case: High lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 1100]$ ),  $\delta h = 0.04[m]$

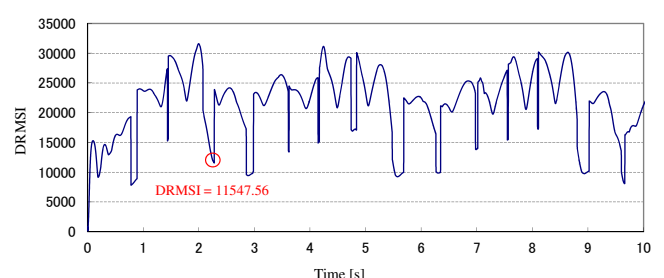


Fig. 17: Case: Low lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$ ),  $\delta h = 0.05[m]$

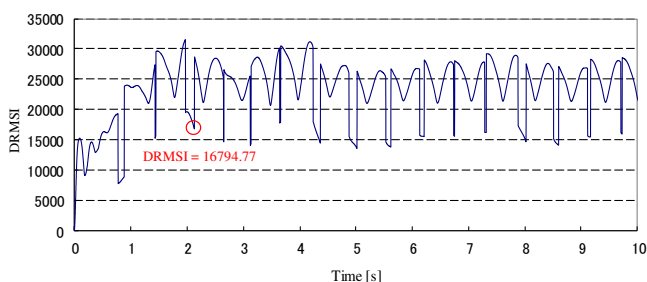


Fig. 13: Case: Low lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$ ),  $\delta h = 0.01[m]$

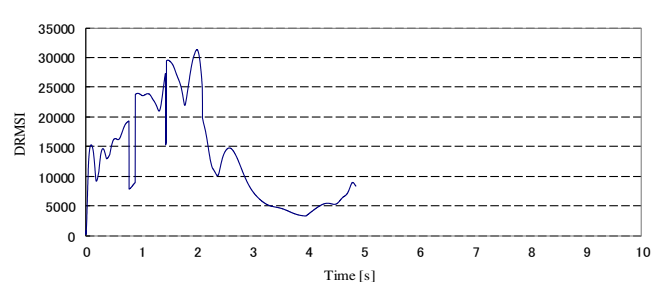


Fig. 18: Case: Low lifting-gain ( $K_p = \text{diag}[20, 290, 950]$ ),  $\delta h = 0.06[m]$

# 複素ホップフィールドネットワークに関する 勾配降下学習の雑音耐性

○小林正樹 (山梨大学)

## Noise Robustness of Gradient Descent Learning Rule for Complex-valued Hopfield Network

\*Masaki Kobayashi (University of Yamanashi)

**Abstract**— Complex-valued Hopfield networks have had problems for learning time, storage capacity and noise robustness. Lee proposed gradient descent learning rule to improve their storage capacity. After that, a modified gradient descent learning rule is proposed to improve their learning time and noise robustness. It was concluded that the improvement was related to the variance of weighted sum inputs for the training patterns. In the present work, we attempted to improve noise robustness by continuing learning algorithm for a long time.

**Key Words:** Complex-valued Hopfield network, gradient descent learning, noise robustness

### 1 はじめに

近年、ニューラルネットワークの複素数値化が盛んに研究されている<sup>4, 5, 6, 17</sup>。ホップフィールドネットワークはその代表例である<sup>2, 3</sup>。複素ホップフィールドネットワークの記憶容量、雑音耐性、学習時間を改善するために、これまで多くの学習法が提案されてきた<sup>7, 13, 14, 15, 16, 18, 19, 23</sup>。ヘブ則は極めて単純かつ高速な学習則であるが、記憶容量が極めて乏しい<sup>7, 8, 18, 19, 20</sup>。プロジェクトンルールは高速な学習則であるが、ネットワーク構造に制限がある<sup>9, 11, 16</sup>。勾配降下学習は長い学習時間を要するが、ネットワーク構造の制限が厳しくない。Lee は複素ホップフィールドネットワーク用の勾配降下学習を提案した<sup>15</sup>。Lee の勾配降下学習は入力と位相情報のみに基づいている。その後、位相情報と振幅の両方に基づいた勾配降下法が提案され、学習時間と雑音耐性が改善された<sup>14</sup>。学習時間が改善された理由は、Lee の学習則では平方根を計算する必要があるが、改良された方法では四則演算のみで計算できることと考えられている。また、雑音耐性が改善された理由は、Lee の学習則では入力と振幅がばらつくため、一部のニューロンが雑音に弱くなり、一方、改良された方法ではばらつきが小さくなることと推測されている。いずれの方法においても、全ての学習パターンが安定した時に学習が打ち切られている。その後も学習を継続することにより、雑音耐性が向上することが期待される。本研究では、学習を継続することにより雑音耐性が改善するかどうかを実験した。その実験結果を報告する。

### 2 記号

幾つかの記号を定義する。

$i$  : 虚数単位

$\text{Re}(z)$  : 複素数  $z$  の実数部

$N$  : ニューロン数。

$K$  : ニューロンの量子化数。

$P$  : 学習パターン数。

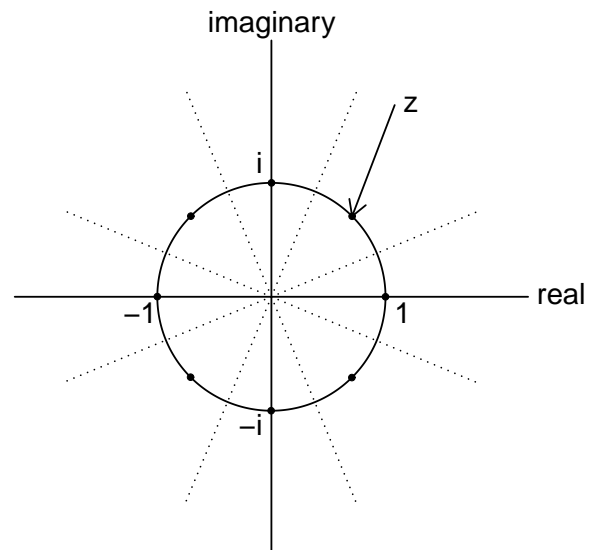


Fig. 1: Activation function in the case of  $K = 8$ .

$z_j = x_j + y_j i$  : ニューロン  $j$  の状態。

$w_{jk} = u_{jk} + v_{jk} i$  : ニューロン  $k$  からニューロン  $j$  への結合荷重。

$S_j = R_j + I_j i$  : ニューロン  $j$  への入力。

$z_j^p = x_j^p + y_j^p i$  :  $p$  番目の学習パターンのニューロン  $j$  の状態。

$S_j^p = R_j^p + I_j^p i$  :  $p$  番目の学習パターンが複素ホップフィールドネットワークに与えられたときのニューロン  $j$  への入力。

$\eta$  : 学習率。

結合荷重には条件  $w_{jk} = \bar{w}_{kj}$  が要求されている。したがって、 $u_{jk} = u_{kj}$  および  $v_{jk} = -v_{kj}$  が成り立つ。この条件により、複素ホップフィールドでネットワークは

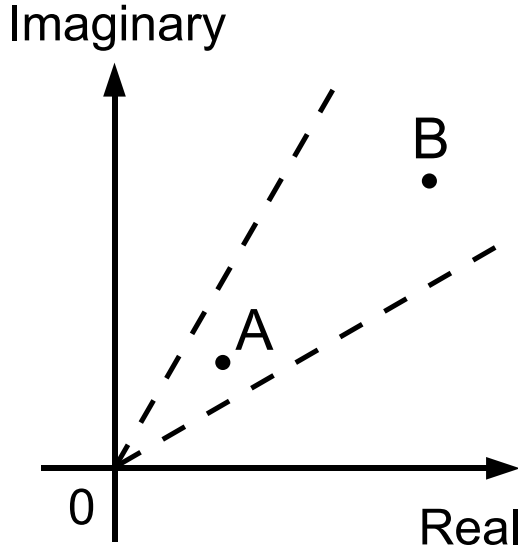


Fig. 2: Variance of weighted sum inputs.

安定状態に到達することが保証される．ニューロン  $j$  への入力  $S_j$  は以下の式で定義される．

$$S_j = \sum_{k \neq j} w_{jk} z_k. \quad (1)$$

また，複素数  $z = e^{i\theta}$  に対して，活性化関数  $f(z)$  は以下の式で与えられる．

$$f(z) = \begin{cases} 1 & 0 \leq \theta < \theta_K \\ e^{2\theta_K i} & \theta_K \leq \theta < 3\theta_K \\ \vdots & \vdots \\ e^{2(K-1)\theta_K i} & (2K-3)\theta_K \leq \theta < (2K-1)\theta_K \\ 1 & (2K-1)\theta_K \leq \theta < 2\pi \end{cases} \quad (2)$$

Fig. 1 はニューロンの量子化数が  $K = 8$  の場合の活性化関数を表す．

### 3 Lee の勾配降下学習

Lee は次の誤差関数  $E_L$  を元に勾配降下学習を提案した<sup>15)</sup>．

$$E_L = \sum_{p,j} \left( 1 - \operatorname{Re} \left( \frac{\bar{z}_j^p S_j^p}{|S_j^p|} \right) \right). \quad (3)$$

この誤差関数  $E_L$  は，入力  $S_j^p$  の位相と教師信号との違いのみを反映し，振幅は考慮していない．勾配降下学習則は以下の式を計算することによって得られる．

$$\Delta u_{jk} = -\eta \frac{\partial E_L}{\partial u_{jk}}, \quad (4)$$

$$\Delta v_{jk} = -\eta \frac{\partial E_L}{\partial v_{jk}}, \quad (5)$$

### 4 改良された勾配降下学習

小林らは次の誤差関数  $E$  に基づいた勾配降下学習を提案した<sup>14)</sup>．

$$E = \frac{1}{2} \sum_{p,j} |S_j^p - z_j^p|^2 \quad (6)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{p,j} \left\{ (R_j^p - x_j^p)^2 + (I_j^p - y_j^p)^2 \right\} \quad (7)$$

この誤差関数  $E$  は，入力  $S_j^p$  の位相と振幅の両方を考慮に入れている．従って，Lee の定義した誤差関数より，学習に要求する要件が厳しいことになる．勾配降下学習則は Lee の場合と同様に，以下の式を計算することによって得られる．

$$\Delta u_{jk} = -\eta \frac{\partial E}{\partial u_{jk}}, \quad (8)$$

$$\Delta v_{jk} = -\eta \frac{\partial E}{\partial v_{jk}}. \quad (9)$$

これらを計算して次の学習則を得る．

$$\Delta u_{jk} = \eta \sum_p (2x_j^p x_k^p + 2y_j^p y_k^p - x_j^p R_k^p - x_k^p R_j^p - y_j^p I_k^p - y_k^p I_j^p), \quad (10)$$

$$\Delta v_{jk} = \eta \sum_p (2x_j^p x_k^p - 2y_j^p y_k^p + x_j^p I_k^p - x_k^p I_j^p - y_j^p R_k^p + y_k^p R_j^p), \quad (11)$$

$$\Delta w_{jk} = \Delta u_{jk} + \Delta v_{jk} i \quad (12)$$

$$= \eta \sum_p (2z_j^p \bar{z}_k^p - z_j^p \bar{S}_k^p - \bar{z}_k^p S_j^p). \quad (13)$$

小林らの行った計算機シミュレーションの結果に基づいて，Lee の提案した勾配降下学習則と改良された勾配降下学習則を比較すると以下ようになる<sup>14)</sup>．

1. 記憶容量が小さい．
2. 学習が早い．
3. 雑音耐性が高い．

1つ目の結果は，改良された誤差関数が Lee の誤差関数より厳しい要求をしているため当然である．

2つ目の結果は，誤差関数の要求の厳しさからすると不自然なように感じられる．Lee の勾配降下学習則は平方根の計算を要する．一方，小林らの勾配降下学習則は加法と乗法で実現されている．そのため，計算量が小さくなると考えられる．

3つ目の結果は，入力  $S_j^p$  の振幅のばらつきが原因と考えられている．Lee の勾配降下学習則では，一部の入力  $S_j^p$  の振幅が極端に小さくなり，雑音の影響を受けやすい可能性があると考えられている．図 2 に示されているように，同じ領域に入る入力  $S_j^p$  でも A の位置と B の位置では A の方が雑音に弱いと予想される．改良された勾配降下学習則では，全ての入力  $S_j^p$  の振幅の差が小さいため，雑音の影響を受けやすいニューロンが少ないと考えられている．

この計算機シミュレーションでは，全ての学習パターンが安定した時点で学習を停止していた．全ての学習パターンが安定した後も学習を継続することで，さらに雑音耐性が改善すると期待できる．

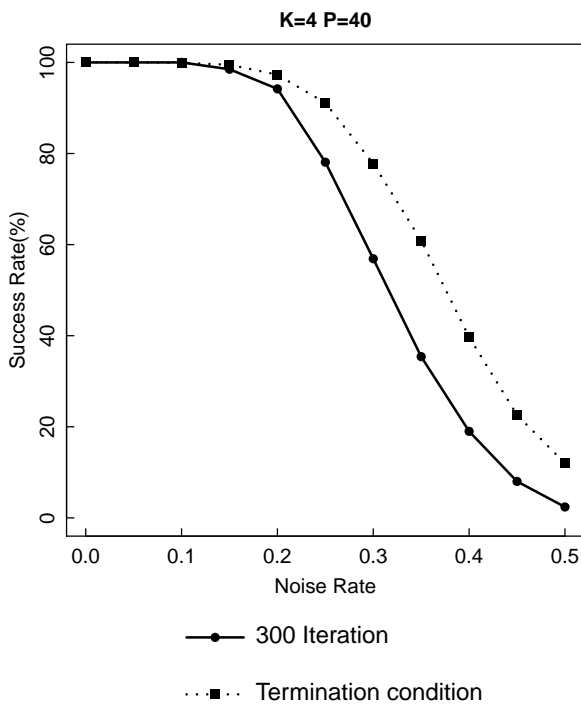


Fig. 3: Simulation result for noise robustness in the case of  $N = 100, K = 4$  and  $P = 40$ .

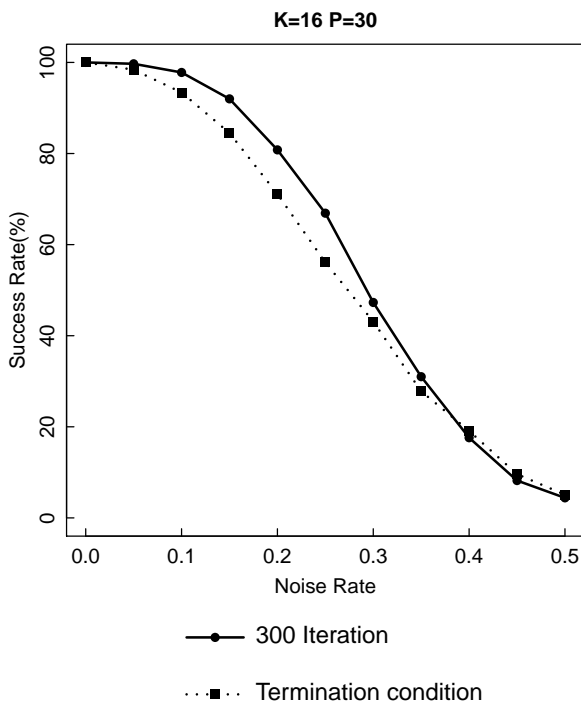


Fig. 4: Simulation result for noise robustness in the case of  $N = 100, K = 16$  and  $P = 30$ .

## 5 計算機シミュレーション

学習を長時間継続することにより雑音耐性が改善するかどうかを調べるために計算機シミュレーションを行った。雑音の与え方は以下のとおりである。

1. 各ニューロンに対して確率  $r$  で雑音を付加した。
2. 雑音はニューロンの状態を  $K$  個の状態からラン

ダムに選んで置き換えた。

確率  $r$  を雑音率と呼ぶ。20種類の学習パターンの組を生成し、各学習パターンの組に対して50回ずつシミュレーションを行った。比較に使用された学習の停止条件は以下の2つである。

1. 300回まで更新する。
2. 全ての  $p$  と  $j$  に対して、 $|S_j^p - z_j^p| < \sin \theta_K$  が満たされた時に停止する。このとき、全ての入力値は教師信号から決定境界より近い位置にある。

停止条件 2. において、すべての試行が 300 回以前に停止した。ニューロン数  $N$  は 100 とした。

シミュレーション結果は、雑音耐性が改善される場合と逆に悪くなる場合の両方が得られた。Fig. 3 は改善されなかった場合の例である。このときの、ニューロンの量子化数とパターン数はそれぞれ  $K = 4$  と  $P = 40$  であった。この場合は、かなりの雑音耐性の低下がみられる。Fig. 4 は改善された場合の例である。このときの、ニューロンの量子化数とパターン数はそれぞれ  $K = 16$  と  $P = 30$  であった。この場合は、雑音耐性が若干上昇している。

## 6 おわりに

本研究では、学習が収束した後も学習を継続することにより雑音耐性を改善することを試みた。しかしながら、計算機シミュレーションの結果では、良い時と悪いときの両方が得られた。その原因は今のところ明確でない。複素ホップフィールドネットワークの雑音耐性はしばしば回転不変性の立場から説明される<sup>1, 10, 12, 21, 22</sup>。しかし、改良された勾配降下学習則の場合は、雑音耐性を改善したことについて異なる理由付けがされてきた。本研究における計算機シミュレーションの結果も、回転不変性の立場から検討し、雑音耐性の改善につなげていきたい。

## 参考文献

- 1) S. Furusawa and M. Kobayashi : Chaotic complex-valued bidirectional associative memory with a real-valued context part, *Nonlinear Theory and Its Applications*, Vol.5, No.2, 222/234 (2014)
- 2) J. J. Hopfield : Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol. 79, No. 8, 2554/2558 (1982)
- 3) J. J. Hopfield : Neurons with graded response have collective computational properties like those of two-state neurons, *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, Vol.81, No.10, 3088/3092 (1984)
- 4) A. Hirose : *Complex-valued neural networks: theories and applications*, Series on Innovative Intelligence, 5, New Jersey, World Scientific (2004)
- 5) A. Hirose : *Complex-valued neural networks, second edition*, Series on Studies in Computational Intelligence, Springer (2012)
- 6) A. Hirose: *Complex-valued neural networks: advances and applications*, The IEEE Press Series on Computational Intelligence, Wiley-IEEE Press (2013)
- 7) S. Jankowski, A. Lozowski and J. M. Zurada : Complex-valued multistate neural associative memory, *IEEE Transactions on Neural Networks*, Vol.7, No.6, 1491/1496 (1996)

- 8) M. Kitahara and M. Kobayashi : Fundamental abilities of rotor associative memory, Proceedings of IEEE/ACIS International Conference on Computer and Information Science, 497/502 (2010)
- 9) M. Kitahara and M. Kobayashi : Complex-valued associative memory with strong thresholds, Proceedings of International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, 362/365 (2011)
- 10) 北原倫理, 小林正樹, 服部元信 : ロータ連想記憶による偽記憶の削減, 電気学会論文誌 C, Vol.131, No.1, 109/115 (2011)
- 11) M. Kitahara and M. Kobayashi : Projection rule for complex-valued associative memory with large constant terms, Nonlinear Theory and Its Applications, Vol.3, No.3, 426/435 (2012)
- 12) M. Kitahara and M. Kobayashi : Projection rule for rotor Hopfield neural networks, IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, to be published
- 13) M. Kobayashi : Pseudo-relaxation learning algorithm for complex-valued associative memory, International Journal of Neural Systems, Vol.18, No.2, 147/156 (2008)
- 14) M. Kobayashi, H. Yamada and M. Kitahara : Noise robust gradient descent learning for complex-valued associative memory, IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Science, Vol.E94-A, No.8, 1756/1759 (2011)
- 15) D. L. Lee : Improving the capacity of complex-valued neural networks with a modified gradient descent learning rule, IEEE Transactions on Neural Networks, Vol.12, No.2, 439/443 (2001)
- 16) D. L. Lee : Improvements of complex-valued Hopfield associative memory by using generalized projection rules, IEEE Transactions on Neural Networks, Vol.17, No.5, 1341/1347 (2006)
- 17) T. Nitta : Complex-valued neural networks: utilizing high-dimensional parameters, Information Science Publishing (2008)
- 18) A. J. Noest : Phasor neural networks, Neural information processing systems; Proceedings of the First IEEE Conference, 584/591 (1988)
- 19) A. J. Noest : Discrete-state phasor neural networks, Physical Review A, Vol.38, No.4, 2196/2199 (1988)
- 20) Y. Suzuki, M. Kitahara and M. Kobayashi : Dynamic complex-valued associative memory with strong bias terms, Proceedings of International Conference on Neural Information Processing, 362/365 (2011)
- 21) Y. Suzuki and M. Kobayashi : Complex-valued bidirectional auto-associative memory, Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks, 984/990 (2013)
- 22) Y. Suzuki, M. Kitahara and M. Kobayashi : Complex-valued bipartite auto-associative memory, IEICE Transactions on Fundamentals of Electronics, Communications and Computer Science, to be published
- 23) M. K. Muezzinoglu, C. Guzelis and J. M. Zurada : A new design method for the complex-valued multistate Hopfield associative memory, IEEE Transactions on Neural Networks, Vol.14, No.4, 891/899 (2003)

# 探索枝刈りによる複素多層パーセプトロン探索の高速化

○佐藤聖也 中野良平 (中部大学)

## Speeding Up of Complex-Valued Multilayer Perceptron Learning by Search Pruning

\*S. Satoh and R. Nakano (Chubu University)

**Abstract**— In the search space of a complex-valued multilayer perceptron having  $J$  hidden units, C-MLP( $J$ ), there exist flat areas called singular regions, as is the case with a real-valued MLP. We have found that singular regions created by the optimum of MLP( $J$ ) can be excellent starting points for the search of MLP( $J+1$ ). Making good use of this characteristic, C-SSF was proposed and showed excellent solution quality; however, the processing time gets larger as  $J$  gets large. This paper proposes C-SSF1.1, a faster version of C-SSF. C-SSF1.1 introduces search pruning, where a search is pruned if its route is considered to merge one of previous search routes. The present method is evaluated through computer experiments.

**Key Words:** Complex-valued multilayer perceptron, Singular region, Search pruning

### 1 まえがき

複素多層パーセプトロン (C-MLP) の学習法として、複素バックプロパゲーション法 (C-BP) <sup>6, 7)</sup> や準 Newton 法の一種の複素 BFGS 法 (C-BFGS) <sup>12)</sup> などが用いられる。C-BP は探索空間の勾配を利用して学習するが、C-BFGS は勾配のみでなく、探索空間の Hesse 行列の近似も利用するため、高い求解性能を有し高速学習が可能との報告がある <sup>12)</sup>。

しかし、複素 MLP の探索空間には、実 MLP と同様、勾配がゼロの特異領域が存在するため、C-BFGS を用いたとしても常に良質の解が得られるとは限らない。特異領域を回避する実 MLP の探索法 <sup>1, 2)</sup> が提案されたが、もし回避できたとしても、その後良質の解が得られる保証はない。

なお、MLP に限らず、パラメータ空間に特異領域が存在する学習モデルは、ガウス混合モデルや隠れマルコフモデルなどの有用な学習モデルの多くに共通していることに着目し、特異モデルやその学習に関する数学的解明がなされて来た <sup>13, 14)</sup>。

複素 MLP の特異領域は  $J-1$  個の隠れユニットを持つ複素 MLP の最適解に可約性写像を適用することで形成される。このように形成された特異領域のほとんどは降下するルートが存在する鞍点である <sup>8)</sup>。この性質に着目し、学習が停滞する特異領域を回避するのではなく、逆に利用する複素特異階段追跡法 (C-SSF: Complex Singularity Stairs Following) が提案された <sup>11)</sup>。この方法は実 MLP の探索法である SSF1.2<sup>9)</sup> を複素 MLP に拡張した方法であり、隠れユニットを 0 個 (定数を出力する複素 MLP) から一つずつ増やして探索する。隠れユニットを  $J-1$  個から  $J$  個に増やす際は、隠れユニットが  $J-1$  個の最適解に可約性写像を適用して特異領域を形成する。その後、特異領域上の固有値と固有ベクトルを利用して特異領域から探索空間を降下するため、隠れユニットが  $J$  個の解は  $J-1$  個の最適解よりも訓練誤差を減少させることができ、隠れユニットが  $J$  個の MLP にふさわしい解が得られる。

しかし、SSF1.2 や C-SSF は隠れユニットの増加とともに探索数が増え、処理負荷が増大する傾向にある。また、これらの探索法により得られた解の中には解の

重複が多く見られた。これらのことから、SSF1.2 を高速化するため、過去の探索に合流する探索を途中で枝刈りする手法を SSF1.2 に導入した SSF1.3 が提案された <sup>10)</sup>。SSF1.3 は SSF1.2 の解品質を劣化させることなく処理時間を削減できる。

本稿では、学習が停滞する特異領域を積極的に利用する SSF1.2 に探索枝刈り処理を導入した SSF1.3 を複素 MLP に拡張適用した C-SSF1.1 を提案する。この探索法は隠れユニットの増加に伴った訓練誤差の減少が保証されるため、隠れユニットが  $J$  個の複素 MLP にふさわしい解を安定して得ることや、C-SSF よりも処理時間を大幅に削減することが期待できる。後述の計算機実験にて提案法の有効性を評価する。

### 2 複素多層パーセプトロンの特異領域

#### 2.1 可約性写像と特異領域

本節では、 $J-1$  個の隠れユニットを持つ複素 MLP の最適解に可約性写像を適用して隠れユニットを一つ追加することで、隠れユニット  $J$  個の探索空間内に特異領域が形成されることを簡単に説明する。

ここで、隠れユニットが  $J$  個、出力ユニット 1 個の複素 MLP を複素 MLP( $J$ ) とする。その出力は以下である。

$$f_J(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}_J) = w_0 + \sum_{j=1}^J w_j z_j, \quad z_j \equiv g(\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}) \quad (1)$$

ただし、 $\boldsymbol{\theta}_J = \{w_0, w_j, \mathbf{w}_j, j = 1, \dots, J\}$ 、重みや入出力は全て複素数とする。学習データ  $\{(\mathbf{x}^\mu, y^\mu), \mu = 1, \dots, N\}$  が与えられて、以下の目的関数を最小にすることを考える。

$$E_J = \sum_{\mu=1}^N \mu \overline{\mu}, \quad \mu \equiv f_J(\mathbf{x}^\mu; \boldsymbol{\theta}_J) - y^\mu \quad (2)$$

さらに、隠れユニットが  $J-1$  個の複素 MLP( $J-1$ ) を考える。

$$f_{J-1}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}_{J-1}) = u_0 + \sum_{j=2}^J u_j v_j, \quad v_j \equiv g(\mathbf{u}_j^T \mathbf{x}) \quad (3)$$

ただし,  $\theta_{J-1} = \{u_0, u_j, \mathbf{w}_j, j=2, \dots, J\}$  とする. この複素 MLP( $J-1$ ) の最適解を  $\hat{\theta}_{J-1}$  とする.

いま, 3種の可約性写像  $\alpha, \beta, \gamma$  を考え, 複素 MLP( $J-1$ ) の最適解  $\hat{\theta}_{J-1} = \{\hat{u}_0, \hat{u}_j, \hat{\mathbf{w}}_j, j=2, \dots, J\}$  に3種の可約性写像を適用して得られる領域をそれぞれ  $\hat{\Theta}_J^\alpha, \hat{\Theta}_J^\beta, \hat{\Theta}_J^\gamma$  とする.

$$\hat{\theta}_{J-1} \xrightarrow{\alpha} \hat{\Theta}_J^\alpha, \quad \hat{\theta}_{J-1} \xrightarrow{\beta} \hat{\Theta}_J^\beta, \quad \hat{\theta}_{J-1} \xrightarrow{\gamma} \hat{\Theta}_J^\gamma$$

$$\hat{\Theta}_J^\alpha \equiv \{\theta_J | w_0 = \hat{u}_0, w_1 = 0, w_j = \hat{u}_j, \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{w}}_j, j=2, \dots, J\} \quad (4)$$

$$\hat{\Theta}_J^\beta \equiv \{\theta_J | w_0 + w_1 g(w_{10}) = \hat{u}_0, \mathbf{w}_1 = [w_{10}, 0, \dots, 0]^T, w_j = \hat{u}_j, \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{w}}_j, j=2, \dots, J\} \quad (5)$$

$$\hat{\Theta}_J^\gamma \equiv \{\theta_J | w_0 = \hat{u}_0, w_1 + w_m = \hat{u}_m, \mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_m = \hat{\mathbf{w}}_m, w_j = \hat{u}_j, \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{w}}_j, j \in \{2, \dots, J\} \setminus \{m\}\} \quad (6)$$

ただし,  $m = 2, \dots, J$  とする. 複素 MLP( $J-1$ ) の最適解  $\hat{\theta}_{J-1}$  に3種の可約性写像を適用して得られる領域  $\hat{\Theta}_J^\alpha, \hat{\Theta}_J^\beta, \hat{\Theta}_J^\gamma$  において, 目的関数  $E_J(\theta)$  の勾配がゼロとなる連続領域 (特異領域) は以下である.

(1) 領域  $\hat{\Theta}_J^\alpha$  と  $\hat{\Theta}_J^\beta$  が重なる領域は  $w_{10}$  が任意である特異領域である. 以下が成立するこの領域を  $\hat{\Theta}_J^{\alpha\beta}$  とする.

$$w_0 = \hat{u}_0, \quad w_1 = 0, \quad \mathbf{w}_1 = [w_{10}, 0, \dots, 0]^T \\ w_j = \hat{u}_j, \quad \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{w}}_j, \quad j = 2, \dots, J \quad (7)$$

(2) 領域  $\hat{\Theta}_J^\gamma$  は, 以下の式を満たす特異領域である.

$$w_1 + w_m = \hat{u}_m \quad (8)$$

## 2.2 複素特異階段追跡法 1.0 と 1.1 の処理の流れ

ここでは文献<sup>11)</sup>で提案した, 特異領域を利用して探索する複素特異階段追跡法 (C-SSF) を C-SSF1.0 と呼ぶ. その処理の流れを以下に示す. 本論文で提案する C-SSF1.1 の処理の流れもほぼ同じであるが, C-SSF1.1 では  $\mathbf{n}_l$  方向に直線探索した後の探索 (search\_from\_singular\_region の 3, 4 行) で探索枝刈り判定を行う. ただし, 考慮する隠れユニットの最大数を  $J_{max}$ , 複素 MLP( $J$ ) の重みを  $w_0^{(J)}, w_j^{(J)}, \mathbf{w}_j^{(J)}$  と表記する.

### 複素特異階段追跡法の処理の流れ

1: 以下のように重みを  $\hat{\Theta}_1^{\alpha\beta}$  上に設定する.

$$w_0^{(1)} \leftarrow \bar{y}, \quad w_1^{(1)} \leftarrow 0, \quad \mathbf{w}_1^{(1)} \leftarrow [p, 0, \dots, 0]^T$$

2: **search\_from\_singular\_region**

3: 探索後の重みの中から最良の重みを選択し,  $\hat{w}_0^{(1)}, \hat{w}_1^{(1)}, \hat{\mathbf{w}}_1^{(1)}$  とする.

4:  $J \leftarrow 2$

5: **while**  $J \leq J_{max}$  **do**

6: 以下のように重みを  $\hat{\Theta}_J^{\alpha\beta}$  上に設定する.

$$w_0^{(J)} \leftarrow \hat{w}_0^{(J-1)}, \quad w_1^{(J)} \leftarrow 0,$$

$$\mathbf{w}_1^{(J)} \leftarrow [p, 0, \dots, 0]^T,$$

$$w_j^{(J)} \leftarrow \hat{w}_j^{(J-1)}, \quad \mathbf{w}_j \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_j^{(J-1)}, \quad j=2, \dots, J$$

7: **search\_from\_singular\_region**

8: **for**  $m = 1, \dots, J-1$  **do**

9: 以下のように重みを  $\hat{\Theta}_J^\gamma$  上に設定する.

$$w_0^{(J)} \leftarrow \hat{w}_0^{(J-1)}, \quad w_1^{(J)} \leftarrow q \times \hat{w}_m^{(J-1)},$$

$$w_{m+1}^{(J)} \leftarrow (1-q) \times \hat{w}_m^{(J-1)},$$

$$\mathbf{w}_1^{(J)} \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_m^{(J-1)}, \quad \mathbf{w}_{m+1}^{(J)} \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_m^{(J-1)},$$

$$w_j^{(J)} \leftarrow \hat{w}_j^{(J-1)}, \quad \mathbf{w}_j \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_j^{(J-1)},$$

$$j \in \{2, \dots, J\} \setminus \{m+1\}$$

10: **search\_from\_singular\_region**

11: **end for**

12: step 2.2 と 2.2 の探索後の重みの中から最良の重みを選択し,  $\hat{w}_0^{(J)}, \hat{w}_j^{(J)}, \hat{\mathbf{w}}_j^{(J)}, j = 1, \dots, J$  とする.

13:  $J \leftarrow J+1$

14: **end while**

### search\_from\_singular\_region

1: Hesse 行列の負の固有値を持つ固有ベクトル  $\mathbf{n}_l$  を取り出す.

2: **for** 全ての  $\mathbf{n}_l$  **do**

3:  $\mathbf{n}_l$  方向に直線探索を行い, 求めた点を初期点として探索を行う.

4:  $-\mathbf{n}_l$  方向に直線探索を行い, 求めた点を初期点として探索を行う.

5: **end for**

ただし, 重みを  $\hat{\Theta}_J^{\alpha\beta}$  上に設定する際の  $p$  と  $\hat{\Theta}_J^\gamma$  上に設定する際の  $q$  は任意の複素数であるが, 今回の実験では,  $p$  は  $-1, 0, 1$  とし,  $q$  は  $0.5, 1.0, 1.5$  (それぞれ内分点, 内分と外分の境界点, 外分点) とした. また, 特異領域から固有ベクトル方向に直線探索を行うときの適切な探索幅を求める方法は黄金分割法<sup>5)</sup>を用い, 黄金分割法で求めた点からの探索は準 Newton 法<sup>12)</sup>の一種である C-BFGS<sup>12)</sup>を用いた.

## 3 探索枝刈りによる高速化

C-SSF1.0 は特異領域を利用することにより安定して各隠れユニット数にふさわしい解を得ることができたが, 隠れユニットが増えるごとに探索数が増え, 処理時間が増大する傾向にあった. また, 特異領域上の複数の点から複数方向へ探索を行うため, 解の重複が多く見られた. そこで, ここでは実 MLP の探索法である SSF1.3<sup>10)</sup> の探索枝刈り処理を C-SSF1.0 に導入することを考える. 探索枝刈り処理では, 現在の探索が以前と同じ探索経路に合流したかどうかを判定し, 合流したと判定した場合はその探索を枝刈りする. これにより, 処理時間の大幅な削減が期待できる. C-SSF1.0 に探索枝刈り処理を導入した方法を C-SSF1.1 と呼ぶ.

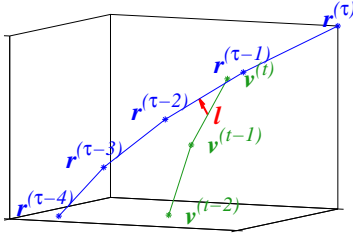


Fig. 1: Conceptual diagram of search pruning of C-SSF1.1.

### 3.1 探索枝刈り判定

いま、現在探索中の点を  $\theta^{(t)}$ 、過去の探索中に記録した点を  $\phi^{(\tau)}$ 、正規化係数ベクトルを  $\mathbf{d}$  とする。ただし、 $\theta^{(t)}$  と  $\phi^{(\tau)}$  は複素数の重みを要素とするベクトルではなく、全ての重みの実部と虚部の値で構成された実ベクトルとする。

ここでは、絶対値が大きい重みのみで判定されることを防ぐため、以下のように正規化する。

$$d_m \leftarrow \begin{cases} \left| \frac{1}{\theta_m^{(t-1)}} \right| & (1 < |\theta_m^{(t-1)}|) \\ 1 & (|\theta_m^{(t-1)}| \leq 1) \end{cases} \quad (9)$$

$$\mathbf{v}^{(t)} \leftarrow \text{diag}(\mathbf{d}) \theta^{(t)} \quad (10)$$

$$\mathbf{v}^{(t-1)} \leftarrow \text{diag}(\mathbf{d}) \theta^{(t-1)} \quad (11)$$

$$\mathbf{r}^{(\tau)} \leftarrow \text{diag}(\mathbf{d}) \phi^{(\tau)}, \quad = 1, \dots, T \quad (12)$$

ただし、 $m = 1, 2, \dots, 2M$ 、 $M$  は重みの数、 $T$  は過去の探索中に記録した点の数とする。 $\text{diag}(\mathbf{d})$  は対角要素が  $\mathbf{d}$ 、その他が 0 の行列とする。ここでは Fig. 1 に示すように、 $\mathbf{v}^{(t-1)}$  と  $\mathbf{v}^{(t)}$  を結んだ線分を含む直線と  $\mathbf{r}^{(\tau-1)}$  と  $\mathbf{r}^{(\tau)}$  を結んだ線分を含む直線の両方に直交する最短の線分を  $\mathbf{l}$  とし、 $\mathbf{l}$  を基に同じルートを通っているか判断し、探索を枝刈りする。

ここで  $\mathbf{l}$  を求めることを考える。二つの線分の始点をそれぞれ  $\mathbf{v}^{(t-1)}$ 、 $\mathbf{r}^{(\tau-1)}$ 、終点をそれぞれ  $\mathbf{v}^{(t)}$ 、 $\mathbf{r}^{(\tau)}$  とする。これら二つの線分を通る直線間の最短の線分は以下で表すことができる。ただし、 $\Delta \mathbf{r}^{(\tau)} \equiv \mathbf{r}^{(\tau)} - \mathbf{r}^{(\tau-1)}$ 、 $\Delta \mathbf{v}^{(t)} \equiv \mathbf{v}^{(t)} - \mathbf{v}^{(t-1)}$  とする。

$$\mathbf{l} = \mathbf{r}^{(\tau-1)} + a_1 \Delta \mathbf{r}^{(\tau)} - (\mathbf{v}^{(t-1)} + a_2 \Delta \mathbf{v}^{(t)}) \quad (13)$$

未知の変数  $\mathbf{a} \equiv [a_1, a_2]^T$  は以下の最小化問題を解けば得られる。

$$\min_{\mathbf{a}} \mathbf{l}^T \mathbf{l} \quad (14)$$

上記式の解は以下となる。ただし、 $b_1 \equiv \|\Delta \mathbf{r}^{(\tau)}\|^2$ 、 $b_2 \equiv \Delta \mathbf{r}^{(\tau)T} \Delta \mathbf{v}^{(t)}$ 、 $b_3 \equiv \|\Delta \mathbf{v}^{(t)}\|^2$ 、 $b_4 \equiv (\mathbf{r}^{(\tau-1)} - \mathbf{v}^{(t-1)})^T \Delta \mathbf{r}^{(\tau)}$ 、 $b_5 \equiv (\mathbf{r}^{(\tau-1)} - \mathbf{v}^{(t-1)})^T \Delta \mathbf{v}^{(t)}$  とする。

$$\mathbf{a} \leftarrow -\frac{1}{b_1 b_3 - b_2^2} \begin{bmatrix} b_3 b_4 - b_2 b_5 \\ b_2 b_4 - b_1 b_5 \end{bmatrix} \quad (15)$$

このとき、以下の式は  $\mathbf{l}$  の始点と終点が二つの線分上に存在するための条件である。

$$0 \leq a_1 \leq 1, \quad 0 \leq a_2 \leq 1 \quad (16)$$

今回の実験では、式 (16) を満たさない場合は以前と同じルートを通っていないと判定する。満たす場合は式 (13) により  $\mathbf{l}$  を求め、全ての要素が  $l_m < \epsilon$  を満たすとき、探索を枝刈る。  $\epsilon$  は 0.3 とし、この判定と  $\theta$  の記録は探索ステップ数が  $\{100, 200, \dots\}$  のときとする。

なお、 $\mathbf{l}$  の要素ではなく、 $\mathbf{l}$  のノルムで判定する方法も考えられる。その場合は重みの次元の増加に伴って閾値を変更する必要がある。しかも、取り除いても複素 MLP の出力が変化しない重みが複数ある場合は、それらの重みを取り除いた場合とそうでない場合で探索が枝刈りされる度合いが変化することも考慮しなければならない。一方、 $\mathbf{l}$  の各要素で判定する場合はそのような考慮は不要である。

### 3.2 探索枝刈り判定の前処理

複素 MLP の活性化関数として、Kim ら<sup>3)</sup> と Leung ら<sup>4)</sup> が独立に提案した以下の活性化関数が用いられる。ただし、 $z = a + ib$ 、 $i = \sqrt{-1}$  とする。

$$\begin{aligned} (z) &= \frac{1}{1 + e^{-z}} \\ &= \frac{1 + e^{-a} \cos b + i e^{-a} \sin b}{1 + 2e^{-a} \cos b + e^{-2a}} \end{aligned} \quad (17)$$

この活性化関数は以下の式が成り立つ。

$$(z) = 1 - (-z) \quad (18)$$

そのため、ある隠れユニットから出力ユニットへ入力される信号は、以下の式が成り立つ。

$$w_j (\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}) = -w_j - w_j (-\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}) \quad (19)$$

この性質のため、以下のように重みを入れ替えても複素 MLP の出力は変わらない。

$$w_0 \leftarrow w_0 - w_j \quad (20)$$

$$w_j \leftarrow -w_j \quad (21)$$

$$\mathbf{w}_j \leftarrow -\mathbf{w}_j \quad (22)$$

そのため、探索枝刈り判定を行う前に  $\text{Re}(w_j)$  の符号を正（もしくは負）にそろえ、上記の活性化関数の性質を考慮した探索の枝刈りを行う。

また、隠れユニットの並びは、活性化関数の種類に依らず、順序を入れ替えても複素 MLP の出力は変わらない。そのため、 $\text{Re}(w_j)$  の符号をそろえた後、 $\text{Re}(w_j)$  が昇順（もしくは降順）となるように隠れユニットの順番を入れ替える前処理を行う。この処理により、隠れユニットの並びを考慮した探索の枝刈りが可能となる。

ただし、これらの重みの変換は探索枝刈り判定の直前にを行い、変換後の重みを次の探索の判定のために記録するが、探索中の重みには変換後の重みを反映させない。

提案した C-SSF1.1 は、以下の特徴がある。ただし、(1)~(3) は C-SSF1.0 にも共通する特徴である。

(1) 複素 MLP ( $J-1$ ) の最適点から複素 MLP ( $J$ ) の探索空間を降下するため、隠れユニットの増加とともに誤差の単調減少が保証され、その隠れユニット数にふさわしい良質の解が得られる。



- (2) 乱数を用いる必要がないため、常に同じ解が得られる。
- (3) 1度実行すれば、さまざまな隠れユニット数の最適重みが得られる。その結果はモデル選択などに有効利用できる。
- (4) C-SSF1.1では現在の探索が以前と同じ探索経路に合流するかどうかを判定し、合流すると判断すると探索を枝刈りする。そのため、C-SSF1.0と比べて計算負荷の大幅な軽減が期待できる。

#### 4 計算機実験

提案した C-SSF1.1 の性能を評価するため、計算機実験では式 (17) の活性化関数を用いた。この活性化関数は、特異点を含む正則関数である。活性化関数が非正則関数である複素 MLP の特異領域については解析が行われた<sup>8)</sup>が、活性化関数が正則関数である複素 MLP の特異領域については詳しい解析がなされていない。しかし、式 (17) の活性化関数は周期性を持ち、かつ、その振幅が入力に依存しているため、入力とともに振幅が変化するような関数に対しても有効に働くと考えられる。

本実験において比較する従来法は、直線探索付きバッチ型複素 BP 法 (C-BP) と準 Newton 法の一つである C-BFGS<sup>12)</sup> とした。従来法の初期重みは実部と虚部共に区間  $(-1, +1)$  の中からランダムに選択し、各  $J$  で 100 回の試行を行った。各試行の終了条件は、スイープ回数が 1 万回を超えるか、探索幅が  $10^{-16}$  以下となった場合とした。コンピュータは CPU : Intel(R) Core i7-2600 3.40 GHz, RAM : 12 GB, OS : Windows 7 Professional の XPS 8300 を使用し、MATLAB R2014a を用いた。

##### 4.1 人工問題 1

人工問題 1 では、以下の重みを持つ複素 MLP から生成したデータを用いて実験を行った。

$$\begin{aligned}
 & (w_0, w_1, w_2, w_3, w_4) \\
 & = (-4 + 3i, 2 - 2i, 3 - 2i, 3 + 5i, 0 - 5i), \\
 & (w_1, w_2, w_3, w_4) \\
 & = \begin{pmatrix} 2 + 4i & 3 + 0i & -5 + 0i & 2 - 2i \\ 5 - 3i & -4 - 2i & -3 - 2i & -4 - 2i \\ 1 + 3i & 3 - 4i & 1 + 1i & -1 - 2i \\ 5 + 5i & -2 - 1i & 4 - 3i & -5 + 2i \\ -3 - 5i & 0 - 1i & 2 - 5i & 4 - 3i \\ 0 + 0i & 0 + 0i & 0 + 0i & 0 + 0i \\ 0 + 0i & 0 + 0i & 0 + 0i & 0 + 0i \\ 0 + 0i & 0 + 0i & 0 + 0i & 0 + 0i \end{pmatrix} \quad (23)
 \end{aligned}$$

訓練データでは、説明変数  $x_k^\mu$  の実部と虚部は領域  $(0,1)$  の中でランダムに生成した。被説明変数  $y^\mu$  の値は上記のように設定した複素 MLP の出力の実部と虚部に小さな正規乱数  $\mathcal{N}(0, 0.01^2)$  を加え、500 個のデータ点を生成した。テストデータでは、 $x_k^\mu$  を訓練データと同様の方法で生成し、 $y^\mu$  には乱数を加えずに 1000 個のデータ点を生成した。考慮する隠れユニット数の最大は  $J_{max} = 6$  とした。

Table 1 に C-SSF1.0 の各  $J$  の探索数と、C-SSF1.1 の各  $J$  で探索を開始した数と途中で枝刈られなかった探索数を示す。また、全ての探索法の処理時間を Table 2 に示す。Table 1 と Table 2 に示すように、C-SSF1.1 の探索開始数は  $J$  の増加に伴って単調増加したが、42%

Table 1: Numbers of initial and final routes of C-SSF for artificial problem 1.

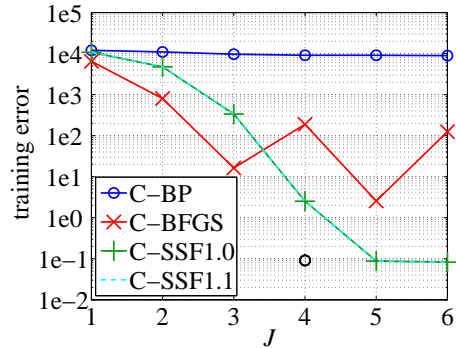
$J$	C-SSF1.0	C-SSF1.1	
		探索開始数	探索数
1	30	30	26
2	56	56	56
3	89	89	71
4	139	139	65
5	162	162	73
6	219	219	113
total	695	695	404

Table 2: CPU time for artificial problem 1 (hr:min:sec).

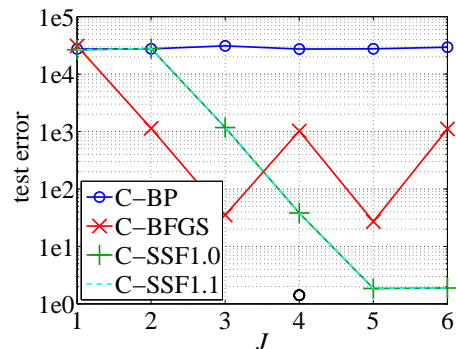
$J$	C-BP	C-BFGS	C-SSF1.0	C-SSF1.1
1	00:34:52	00:00:39	00:00:16	00:00:08
2	01:01:42	00:00:50	00:00:22	00:00:24
3	01:17:47	00:01:17	00:01:23	00:01:17
4	01:41:23	00:02:29	00:08:09	00:04:20
5	01:34:43	00:03:03	00:10:06	00:04:47
6	01:53:50	00:03:41	00:22:28	00:05:52
total	08:04:18	00:11:58	00:42:43	00:16:47

の探索が途中で枝刈りされたことにより、C-SSF1.1 は C-SSF1.0 よりも 2.5 倍速く処理が終了した。

Fig. 2(a), (b) に各  $J$  での最小の訓練誤差とそのときのテスト誤差を示す。図の縦軸は対数表示とした。C-BP では  $J$  が増えてもほとんど誤差が減少しなかった。C-BFGS では  $J = 4, 6$  のとき訓練誤差が増加した。C-SSF1.0 と C-SSF1.1 の結果はほとんど同じで、



(a) Training error.



(b) Test error.

Fig. 2: Training and test errors for artificial problem 1 (The black circle shows the result of learning where the initial weights are set as shown in Eq.(23).).

Table 3: Numbers of initial and nal routes of C-SSF for arti cial problem 2.

$J$	C-SSF1.0	C-SSF1.1	
		探索開始数	探索数
1	18	18	16
2	26	26	23
3	37	37	36
4	63	63	40
5	70	70	55
6	85	85	49
7	93	110	71
8	125	115	70
9	140	567	77
10	656	619	61
11	663	713	419
12	676	485	409
13	829	602	562
14	747	658	577
15	667	668	598
16	808	700	604
total	5703	5536	3667

$J = 1, 2, 3$  のとき C-BFGS よりも訓練誤差が大きい解を得たが、隠れユニットの増加に伴って訓練誤差が単調減少し、 $J = 4$  以降では全ての探索法の中で最も小さい訓練誤差を得た。また、テスト誤差は  $J = 5$  で最小値を得た。

しかし、データ生成に用いた複素 MLP (式 (23)) の隠れユニット数は 4 であるため、 $J = 4$  で最良解が得られると考えられる。そこで、データ生成に用いた複素 MLP を初期値として C-BFGS を用いて  $J = 4$  で学習した結果を Fig. 2(a) に黒丸で示す。図に示すように、学習した結果はどの探索法よりも訓練誤差とテスト誤差が小さい解を得た。C-SSF1.0 と C-SSF1.1 にて特異領域上の初期点を新たに追加することで黒丸と同じ解が得られる可能性があるが、初期点を増やせば処理時間も増加すると考えられる。

#### 4.2 人工問題 2

人工問題 2 では、以下の、対数螺旋の線形和の式から生成したデータを用いて実験を行った。ただし、 $\phi = 2x$  とする。

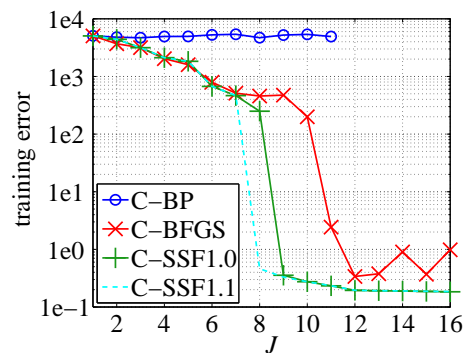
$$y = \begin{cases} 0.001e^{0.1\phi} + 2.5e^{-0.1\phi} + 0.1e^{0.05\phi} \\ e^{2i\phi} + e^{5i(\phi+\pi/3)} + e^{12i\phi} + e^{15i\phi} \end{cases} \quad (24)$$

訓練データの  $x^\mu$  は実数領域  $(0,10)$  の中でランダムに生成し、被説明変数  $y^\mu$  の実部と虚部に小さな正規乱数  $\mathcal{N}(0,0.01^2)$  を加え、1000 個のデータ点を生成した。テストデータは  $x^\mu$  の生成領域を実数領域  $(10, 13)$  とし、 $y^\mu$  に乱数を加えず 1000 個のデータ点を生成した。考慮する隠れユニット数の最大は  $J_{max} = 16$  とした。

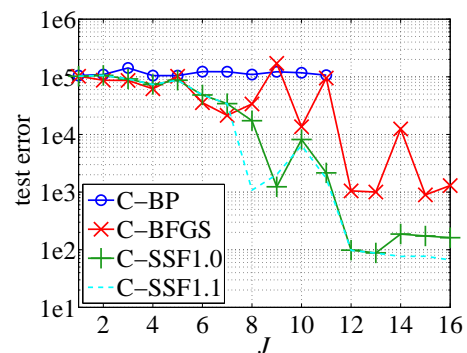
Table 3 に C-SSF1.0 の各  $J$  の探索数と、C-SSF1.1 の各  $J$  で探索を開始した数と途中で枝刈られなかった探索数を示す。また、全ての探索法の処理時間を Table 4 に示す。C-BP の処理は 1 日以上かかったため  $J = 11$  で処理を打ち切った。Table 3 と Table 4 に示すように、C-SSF1.1 の探索開始数は  $J$  の増加に伴って増加する傾向を示したが、34% の探索が途中で枝刈りされたこと

Table 4: CPU time for arti cial problem 2 (hr:min:sec).

$J$	C-BP	C-BFGS	C-SSF1.0	C-SSF1.1
1	00:38:58	00:01:03	00:00:10	00:00:05
2	01:11:01	00:01:46	00:00:20	00:00:16
3	01:12:26	00:03:38	00:00:36	00:00:33
4	01:29:03	00:04:47	00:01:57	00:01:19
5	01:39:42	00:06:10	00:02:51	00:02:32
6	01:55:47	00:07:22	00:02:57	00:02:17
7	02:11:15	00:09:22	00:04:14	00:03:23
8	02:22:59	00:11:08	00:04:32	00:04:04
9	02:33:36	00:13:54	00:14:07	00:22:10
10	02:54:17	00:15:51	02:45:08	00:24:49
11	03:04:18	00:18:23	02:52:13	00:25:46
12	-	00:19:35	02:35:52	00:18:21
13	-	00:22:03	02:55:25	00:14:31
14	-	00:26:08	00:39:25	00:20:55
15	-	00:25:33	00:30:36	00:20:10
16	-	00:28:11	00:42:17	00:23:43
total	21:13:22	03:34:55	13:32:40	03:04:53



(a) Training error.



(b) Test error.

Fig. 3: Training and test errors for arti cial problem 2.

により、C-SSF1.1 は C-SSF1.0 よりも 4.4 倍速く処理が終了し、全ての探索法の中で最も速く終了した。

Fig. 3(a), (b) に各  $J$  での最小の訓練誤差とそのときのテスト誤差を示す。図の縦軸は対数表示とした。C-BP は  $J$  の増加に伴って訓練誤差が減少しておらず、テスト誤差もその他と比べて大きいことがわかる。C-BFGS も  $J = 9, 13, 14, 16$  のとき訓練誤差が増加した。一方、C-SSF1.0 と C-SSF1.1 の結果は若干異なっているが、共に訓練誤差が単調減少し、最小のテスト誤差は  $10^2$  以下となった。

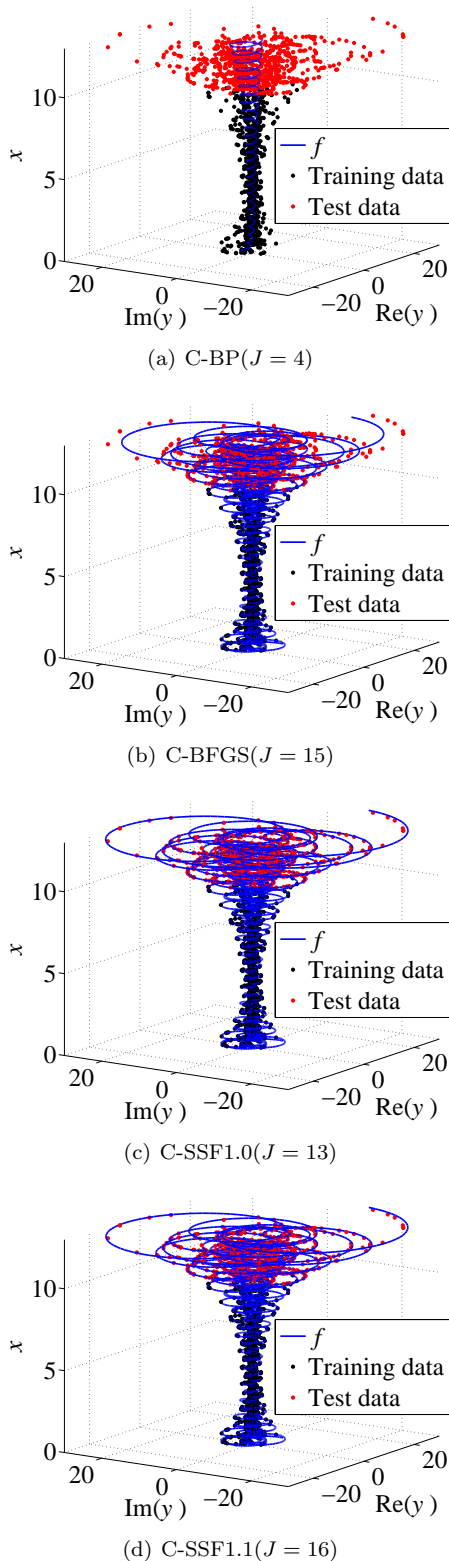


Fig. 4: Outputs of Complex-MLPs.

C-BP, C-BFGS, C-SSF1.0, C-SSF1.1 のテスト誤差が最小となったときの隠れユニット数は、それぞれ  $J = 4, 15, 13, 16$  であった。そのときの複素 MLP の出力を Fig. 4 に示す。Fig. 4 に示すように、C-BP ではほとんど近似できていない。C-BFGS では、 $x$  が大きくなるにつれてずれが大きくなっている。一方、C-SSF1.0 と C-SSF1.1 では  $x = 13$  まですうまく予測できていることがわかる。

## 5 まとめ

本稿では、学習が停滞する特異領域を逆に利用する C-SSF1.0 に探索枝刈り処理を導入した C-SSF1.1 を提案した。この探索法は現在の探索が以前の探索と同じ経路を通っていると判定した場合に探索を枝刈る。これにより、人工問題 1 では 42% の探索を枝刈り、C-SSF1.0 よりも 2.5 倍速く処理が終了し、人工問題 2 では、34% の探索を枝刈り、C-SSF1.0 よりも 4.4 倍速く処理が終了した。また、C-SSF1.1 は、C-SSF1.0 と同様、隠れユニットの増加に伴って訓練誤差が単調減少し、C-BP や C-BFGS よりも小さいテスト誤差の解を得た。そのため、C-SSF1.1 は解品質を劣化させることなく、C-SSF1.0 よりも大幅に処理時間を削減できたとと言える。

今後の課題として、C-SSF1.1 で利用する特異領域上のより良い初期点を見つけることが挙げられる。これにより、人工問題 1 の  $J = 4$  で得られなかった最良解が得られるようになる可能性がある。

## 謝辞

本研究は JSPS 科研費 25330294 および中部大学特別研究費 26IS19A の助成を受けて行った。

## 参考文献

- 1) S. Amari: Natural gradient works efficiently in learning, *Neural Comput.*, **10**(2), 251/276 (1998)
- 2) S. Amari, H. Park, and K. Fukumizu: Adaptive method of realizing natural gradient learning for multilayer perceptrons, *Neural Comput.*, **12**(6), 1399/1409 (2000)
- 3) M.S. Kim and C.C. Guest: Modification of backpropagation networks for complex-valued signal processing in frequency domain, *Proc. IJCNN*, **3**, 27/31 (1990)
- 4) H. Leung and S. Haykin: The complex backpropagation algorithm, *IEEE Trans. Signal Process.*, **39**(9), 2101/2104 (1991)
- 5) D.G. Luenberger: *Linear and nonlinear programming*, Addison-Wesley Publishing Company, Reading, Massachusetts (1984)
- 6) 新田徹, 古谷立美: 複素バックプロパゲーション学習, *情報処理学会論文誌*, **32**(10), 1319/1329 (1991)
- 7) T. Nitta and M. Tanaka: Current status of research on neural networks with high-dimensional parameters, *Circulars of the Electrotechnical Laboratory*, 228, (1999)
- 8) T. Nitta: Local minima in hierarchical structures of complex-valued neural networks, *Neural Networks*, **43**, 1/7 (2013)
- 9) S. Satoh, and R. Nakano: Fast and stable learning utilizing singular regions of multilayer perceptron, *Neural Process. Lett.*, **38**(2), 99/115 (2013)
- 10) 佐藤聖也, 中野良平: 特異領域を利用した多層パーセプトロン探索法の探索枝刈り, *信学論 (D)*, **J97-D**(2), 330/340 (2014)
- 11) 佐藤聖也, 中野良平: 複素パラメータ空間の特異領域を利用した複素多層パーセプトロン探索法, 第 3 回コンピュータショナル・インテリジェンス研究会, 103/108 (2013)
- 12) 鈴木真矢, 中野良平: 複素 BFGS 法を用いた複素ニューラルネットワークの学習法, *信学論 (D)*, **J96-D**-3, 423/431 (2013)
- 13) S. Watanabe: A formula of equations of states in singular learning machines, *Proc. IJCNN*, 2099/2106 (2008)
- 14) S. Watanabe: *Algebraic geometry and statistical learning theory*, Cambridge University Press, Cambridge, (2009)

# ミリ波イメージングにおける適応的区分化のための複素自己組織化マップのダイナミクス

有馬悠也 廣瀬明 (東京大学)

## Dynamics of Complex-valued Self-Organizing Map for Adaptive Classification in Millimeter-wave Active Imaging System

\*Yuya Arima and Akira Hirose (University of Tokyo)

**Abstract**— Millimeter-wave is the regions of electromagnetic wave with a frequency of 30-300GHz. These regions have a high penetration with dielectric materials such as plastic, cloth, paper and etc. and a high directivity. In a security imaging, we use this feature to discover weapons concealed with cloths. In this paper, I propose a millimeter-wave imaging system for moving targets consisting of one-dimensional array antenna, parallel front-end and complex-valued self-organizing map (CSOM) to deal with complex texture. Experiments demonstrate that the CSOM visualizes successfully a liquid-filled small plastic bottle even for measurement data in which we can see almost random phase and amplitude. The system construction is presented with the adaptive processing dynamics in the CSOM.

**Key Words:** Neural network, Self-organizing map, Millimeter-wave

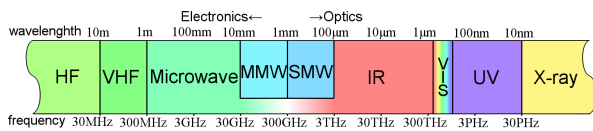


Fig. 1: Spectrum of electromagnetic wave.

### 1 はじめに

近年のマイクロ波やミリ波、X線を用いた電磁波イメージングの発展により様々な場所で多くの物が可視化されている。それらのうち、ミリ波イメージングはセキュリティを含めた生活の場面でますます利用されることが期待されている。我々はアクティブ方式のミリ波イメージングと自己組織化マップ(SOM)による画像区分化を組み合わせたシステムについて提案する。

ミリ波(MMW)とはその名の通り、波長が1~10mmの電磁波のことで周波数は30~300GHzにあたる(Fig. 1)。ミリ波には以下のような特徴がある。

- 減衰が少なく、雲や霧、布などを透過しやすい
- 直進性が高い
- 波長が短いため分解能を高くすることができる

セキュリティイメージングの分野ではこれらの特徴を生かして、服の下などに隠し持った危険物を発見するためにミリ波を応用している。同様の目的ではX線を用いたものも考えられる。しかし、X線は過剰に浴びると人体に影響があるため、空港の手荷物検査などには利用できても乗客を直接検査するためには用いられない。一方、ミリ波は人体に対し無害であるとされるため、その点でも有利である。

イメージング方式にはFig. 2に示すように、大きく分けてパッシブイメージングとアクティブイメージングの2種類の方法が存在する。

パッシブ方式では人体や他の物体がその温度に応じて発する黒体放射、あるいは周囲の自然光源からの電磁波の反射や散乱を観測する<sup>1)</sup>。画像はミリ波アンテナ

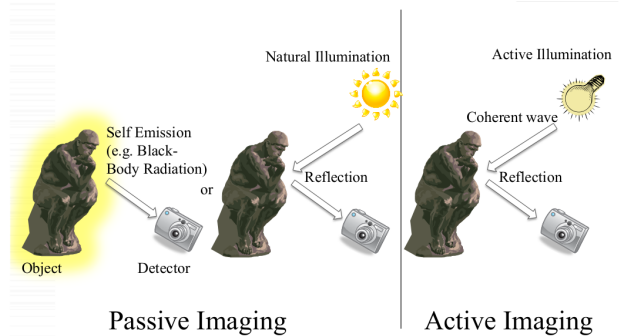


Fig. 2: Passive and Active imaging.

ナ、信号増幅器、そしてショットキーダイオードなどの高周波検出器によって取得される。パッシブイメージング方式は非コヒーレントであり、対象の形状を直接取得するという点で写真撮影に似ている<sup>2)</sup>。しかし、黒体放射の電力はとても小さく、多くの場合コントラストが低いため、計測に時間がかかり移動する対象物のイメージングには向いていない。

一方アクティブイメージング方式では、既知の電磁波を対象物に当て、その透過波または反射波を検出するため、高いコントラストを得ることが出来る。このことは高速な画像取得を可能にする<sup>2)</sup>。照射する電磁波を変調することによって位相情報を利用することもできる。しかし、アクティブイメージング方式ではコヒーレント波を対象に当てるため、反射した波が干渉し合い、スペックルと呼ばれる輝点が生じてイメージング画質を落とす要因となることもある。

我々はFig. 3のような新幹線改札を通過する乗客などの移動する対象を可視化する、次元アレイアンテナと複素自己組織化マップ(CSOM)を組み合わせたミリ波アクティブイメージングシステムを提案する。1ゲートあたり1時間に1000人測定することを想定している。アレイ状のアンテナを用いることは移動する対象を可視化する強力な手段の一つである<sup>3)</sup>。その場合、一般にミリ波システムの重大な課題の一つであるコストを低減するために低コストの並列フロントエ

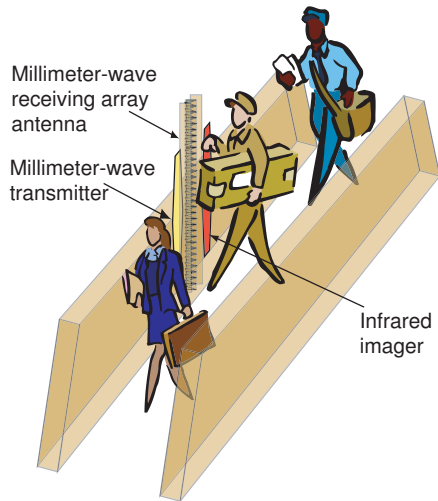


Fig. 3: Security imaging at Shinkansen railway ticket gate.

ンドの開発が必要となる。我々の新型アンテナである bulk linearly-tapered slot antenna (bulk LTSA)<sup>4)</sup> を envelope phase detection (EPD) と組み合わせることによって解決策を提示する。

プライバシーの問題を解決するために、我々のシステムでは低解像度の画像からでも可視化できるよう自己組織化マップ (SOM) を利用する<sup>5)</sup>。SOM は地中に埋まった地雷を可視化する ground penetrating radar (GPR) システムにおいて有効であった。石や土、金属片、地雷の反射率の値は非常に近いが、GPR において我々はそれらの複素振幅テクスチャの差異に注目した。これは現在の乗客の状況と類似している。液体爆弾の入った PET ボトルは人体とほぼ同じ反射率を持つ。そこで、我々は位相情報あるいは複素振幅全体のテクスチャに注目する。

## 2 システム構成

試作したシステムの概要図を Fig. 4 に示す。システムは送信部と受信部、そして画像処理部によって構成される。

### 2.1 計測部

計測にはミリ波を 900MHz 前後の複数の周波数で振幅変調したものをを用いる。シグナルジェネレーターで発生させた 900MHz 前後の信号を送信部で 34GHz の信号と混合し、ホーンアンテナから送信する。対象に当たって反射・散乱された電波を Fig. 5 に示す 8 本のアンテナをアレイ状に並べたフロントエンドで受信する。このフロントエンドは Fig. 6 に示す bulk linearly-tapered slot antenna (bulk LTSA) によって構成されている。このアンテナは我々の研究室で製作された物であり、ミリ波の包絡線検波を行うのに適している<sup>4)</sup>。このアンテナには Fig. 7 に示す回路が直結されており、受信された信号は直ちに全波整流され、ローパスフィルタを通過することで変調に使われた周波数まで落とされる。これにより以降の回路でミリ波を直接取り回す必要がなくなり、減衰やノイズに対する設計コストを大幅に減らすことが出来る。また、位相情報としてミリ波のものではなく変調周波数のものを用いることが出来るようになり、約 900MHz の波長である数十 cm の距離差を検出することが出来るようになる。続

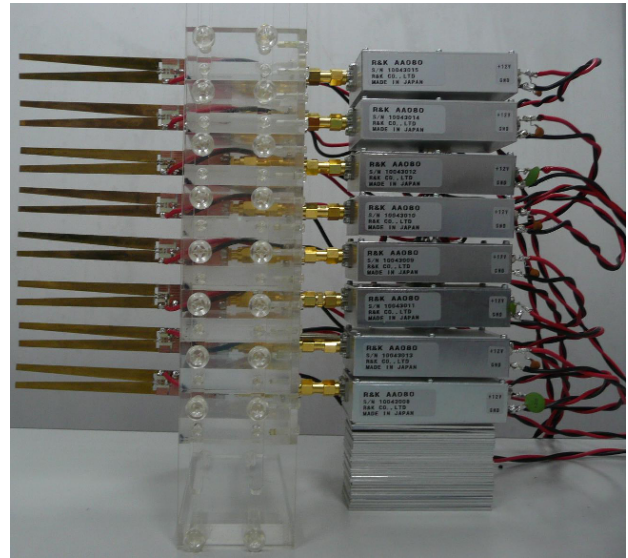
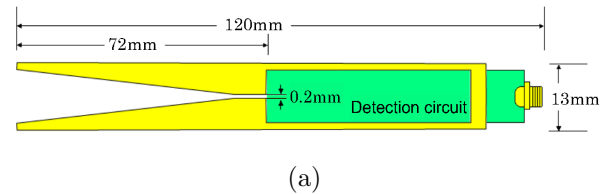
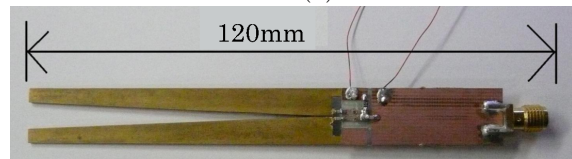


Fig. 5: one-dimensional millimeter-wave antenna array composed of eight LTSA elements.



(a)



(b)

Fig. 6: (a) Design and (b) a photo of bulk linearly tapered slot antennas (bulk LTSAs) including embedded detection circuits.

いて接続された 900MHz 帯用のアンプによって信号は増幅され、IQ 復調器で変調信号とのホモダイン検波が行われ、同相成分と逆相成分に復調される。この同相成分と逆相成分の信号は A/D コンバータを通して PC に送られる。

### 2.2 画像処理

Fig. 8 は画像処理手順の模式図である。本システムでは画像の区分化に自己組織化マップ (SOM) を用いる。

SOM とはニューラルネットワークの一種で、その最大の特徴は教師信号なしに高次元のデータをクラスタリングできる点にある。この教師なしの学習を自己組織化と言う。本システムでは、振幅と位相のデータ、つまり複素数のデータを扱うため複素数に対応した SOM である CSOM (Complex-valued SOM) を利用する<sup>6)</sup>。

まずコヒーレントアクティブイメージング技術を用いて広い周波数帯において、三次元 (空間二次元 × 周波数一次元) の反射/散乱画像を取得する。次に Fig. 9 に示すように実空間上、周波数空間上それぞれの局所的なピクセルの相関を計算することによって、テクスチャ特徴量を抽出する<sup>7)</sup>。

$$\mathbf{K} = [\mathbf{M}, \mathbf{K}_s, \mathbf{K}_f] \quad (1)$$

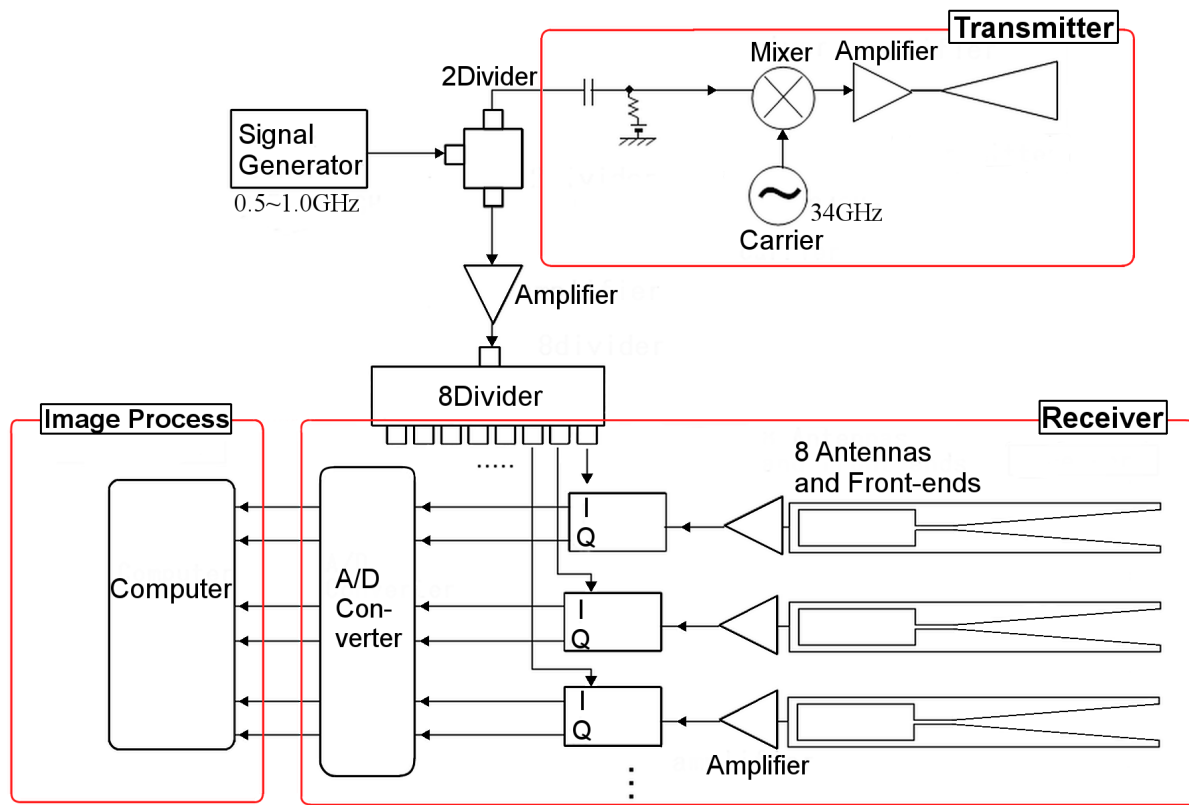


Fig. 4: Millimeter-wave envelope-phase-detection (EPD) radar system including a transmitter, parallel front-end using a bulk linearly tapered slot antenna (bulk LTSA) array, and CSOM image processing unit.

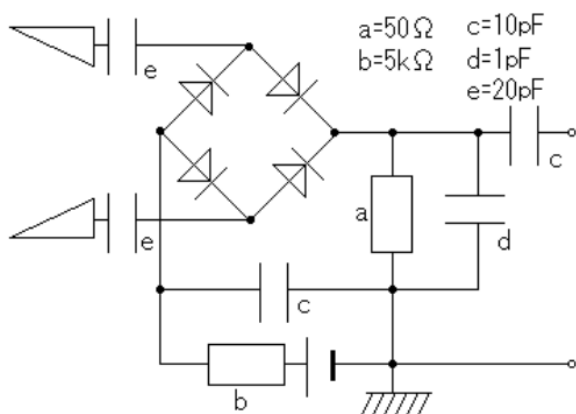


Fig. 7: Detective circuit connected with the antennas directly

$$M = \frac{1}{L_x L_y N} \sum_{l_x=1}^{L_x} \sum_{l_y=1}^{L_y} \sum_{n=1}^N z(l_x, l_y, f_n) \quad (2)$$

$$\mathbf{K}_s = [K_{s(0,0)}, K_{s(1,0)}, K_{s(0,1)}, K_{s(1,1)}] \quad (3)$$

$$K_{s(i,j)} = \frac{1}{L_x L_y N} \sum_{l_x=1}^{L_x} \sum_{l_y=1}^{L_y} \sum_{n=1}^N \{ z^*(l_x, l_y, f_n) z(l_x + i, l_y + j, f_n) \} \quad (4)$$

$$\mathbf{K}_f = [K_{f_1}, \dots, K_{f_{N-1}}] \quad (5)$$

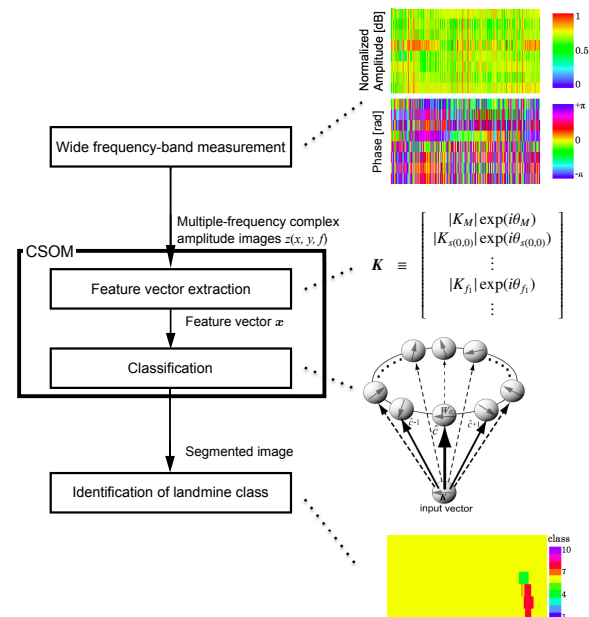


Fig. 8: Flowchart of the total visualization processing.

$$K_{f_n} = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{l_x=1}^{L_x} \sum_{l_y=1}^{L_y} z^*(l_x, l_y, f_n) z(l_x, l_y, f_{n+1}) \quad (6)$$

ただし、 $M$  は局所領域の複素平均、 $\mathbf{K}_s$  は実空間上の相関係数、 $\mathbf{K}_f$  は周波数空間上の相関係数である。また、 $L_x, L_y$  はウィンドウサイズ、 $N$  は総測定周波数点数、 $z$  は取得された複素振幅である。

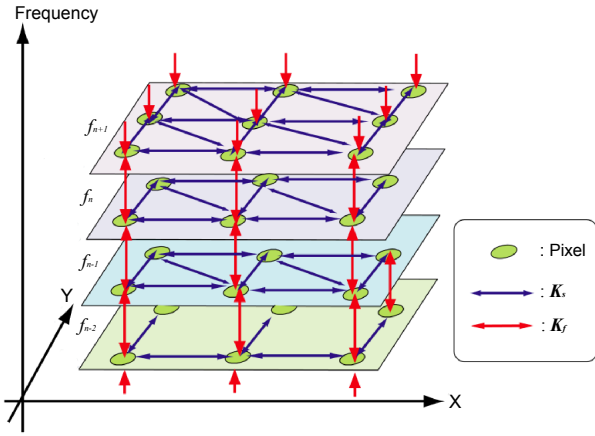


Fig. 9: A sample figure.

こうして得られた特徴量を CSOM に入力し特徴を適応的に区分化して、その区分結果を元の空間画像に投影することでセグメント化された空間画像を得る。

CSOM の参照ベクトル (荷重) を  $w_c$  とする。すなわち、 $w_c$  および  $K$  を要素で書けば次のとおりである。

$$w_c \equiv \begin{bmatrix} |w_{c1}| \exp(i\psi_{c1}) \\ |w_{c2}| \exp(i\psi_{c2}) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$K \equiv \begin{bmatrix} |K_M| \exp(i\theta_M) \\ |K_{s(0,0)}| \exp(i\theta_{s(0,0)}) \\ |K_{s(1,0)}| \exp(i\theta_{s(1,0)}) \\ \vdots \\ |K_{f_1}| \exp(i\theta_{f_1}) \\ |K_{f_2}| \exp(i\theta_{f_2}) \\ \vdots \end{bmatrix} \quad (8)$$

我々は、勝者決定に際して次に示す複素内積を用いた。

$$\begin{aligned} K^* w_c &= \sum_j [|K_j| \exp(-i\theta_j)] [|w_{cj}| \exp(+i\psi_{cj})] \\ &= \sum_j |K_j| |w_{cj}| \exp(i(\psi_{cj} - \theta_j)) \end{aligned} \quad (9)$$

複素内積を用いることで、ユークリッド距離を用いた場合よりも複素数の特徴を生かしたクラス分けを行うことが出来る<sup>7)</sup>

CSOM として、図 11 に示すようにユニットを 1 次元に並べた ring-CSOM を採用した。CSOM 空間にクラス分けのための素子を 10 個用意しており、これにより画像を 10 クラスに区分することが可能である。

具体的な CSOM の学習は次式に示す通りである。

$$w_{\hat{c}}(t+1) = w_{\hat{c}}(t) + \alpha(t)(K - w_{\hat{c}}(t)) \quad (10)$$

$$w_{\hat{c} \pm 1}(t+1) = w_{\hat{c} \pm 1}(t) + \beta(t)(K - w_{\hat{c} \pm 1}(t)) \quad (11)$$

$$\alpha(t) = \alpha(0) \left(1 - \frac{t}{T}\right) \quad (12)$$

$$\beta(t) = \beta(0) \left(1 - \frac{t}{T}\right) \quad (13)$$

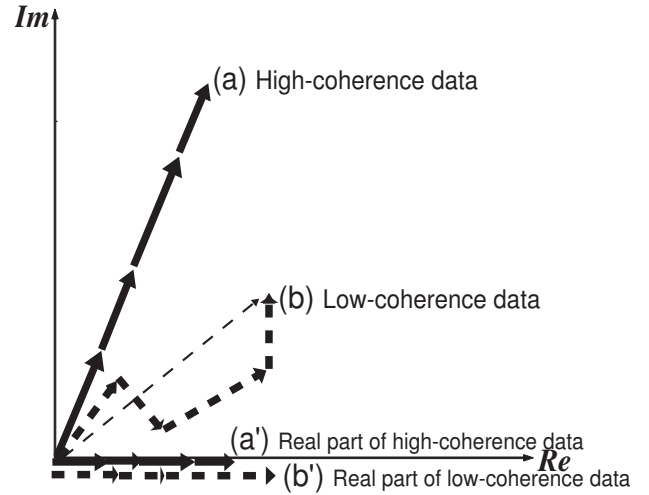


Fig. 10: Conceptual illustration of complex inner product  $K^* w_c$ <sup>7)</sup>.

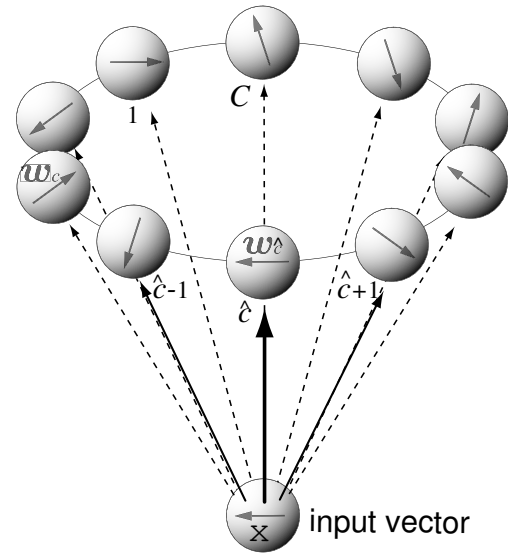


Fig. 11: Construction of the ring-CSOM for textural feature vector classification.

- $\hat{c}$  : winner class
- $w_{\hat{c}}(t)$  : reference vector of the winner class  $\hat{c}$
- $w_{\hat{c} \pm 1}(t)$ : reference vector of the neighbor class  $\hat{c} \pm 1$
- $K$  : input feature vector
- $t$  : iteration number in self-organization
- $T$  : maximum iteration number
- $\alpha(t)$  : self-organization coefficient for the winner
- $\beta(t)$  : self-organization coefficient for the neighbors
- $C$  : number of the neurons in the CSOM

準備しているクラスが 10 個と少ないため、CSOM における近傍の学習は隣接する二つのクラスに行っている。この近傍クラスの学習をすることにより、特徴ベクトルをより適応的にクラス分けすることが期待でき、また特徴ベクトルの互いに類似したクラス同士が隣り合うように CSOM 空間にクラスベクトルを配置することができるようになる。このときの自己組織化の速度や強度は自己組織化係数  $\alpha, \beta$  によって決まる。

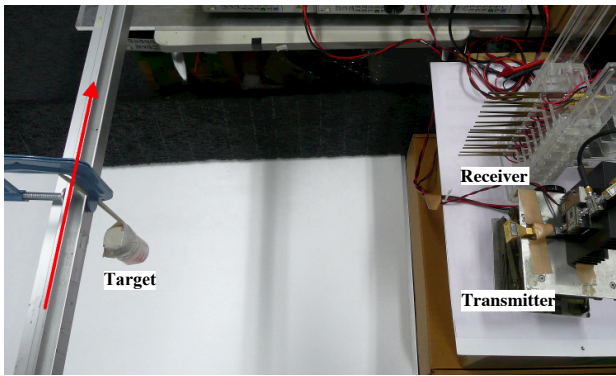


Fig. 12: Experimental setup.

### 3 実験

Fig. 12 は実験の上面図である。対象は水の入った高さ 8cm、直径 4cm のプラスチック製小容器である。これを 2.0cm/s で移動する棒に固定している。測定範囲はおよそ 20cm×50cm で測定時間は 25s である。本実験では背景には何も無い状態で測定している。対象容器の固定位置を変えて複数回測定した。

Fig. 13 に取得した生データの一部を正規化した振幅 [dB] と位相 [rad] として示す。水平方向の目盛りは対象の 2.0cm/s×25s の動きに対応している。一方垂直方向の目盛りはアンテナの全体における高さと同じ。生データには対象物の形状は一見したところでは有意には表れていない。

Fig. 11 の式における勝者ユニットとその近傍ユニットの自己組織化係数  $\alpha, \beta$  を変化させながら CSOM による区分化を行った。 $\alpha$  の値を 0.002 から 0.256、 $\beta$  の値を  $0.01\alpha$  から  $0.32\alpha$  で変化させたときの区分化の結果が Fig. 14, 15 である。それぞれ対象の固定位置が 5cm と 25cm になっている。 $\alpha = 0.032, \beta = 0.1\alpha$  の時が対象を最も区別しやすくなっている。一方、 $\alpha$  に対し  $\beta$  が大きすぎるときには対象が存在しない場所まで多くのクラスに分類されてしまい区別することが困難になっている。

Fig. 16, 17 に移動する対象の写真と可視化結果の比較を示す。Fig. 14, 15 と同様に対象の固定位置が 5cm と 25cm になっている。このときの自己組織化係数は  $\alpha = 0.032, \beta = 0.1\alpha$  である。可視化画像の横軸は測定時間であり、対象の移動に対応している。縦軸は 8本の並列アンテナの位置に対応している。写真と対応する位置に対象物が可視化されていることが分かる。可視化結果は何もはっきりと見えていない生データとは全く異なっている。このように CSOM が有効に働き、低い解像度のデータでも可視化がおこなえることを示した。

### 4 むすび

一次元アレイアンテナと並列フロントエンド、CSOM 処理部によって構成される移動する対象用のミリ波イメージングシステムを提案した。実験により、ランダムなデータと見分けが付かないような測定データからでも CSOM は対象の可視化に成功するというを示した。現在の装置では 8本の並列アンテナによって高さ幅 20cm の範囲を測定できるが、今後は 32本のアンテナで 80cm 幅を測定できるように装置を拡張し、実際に人間を対象に測定を進めていく。

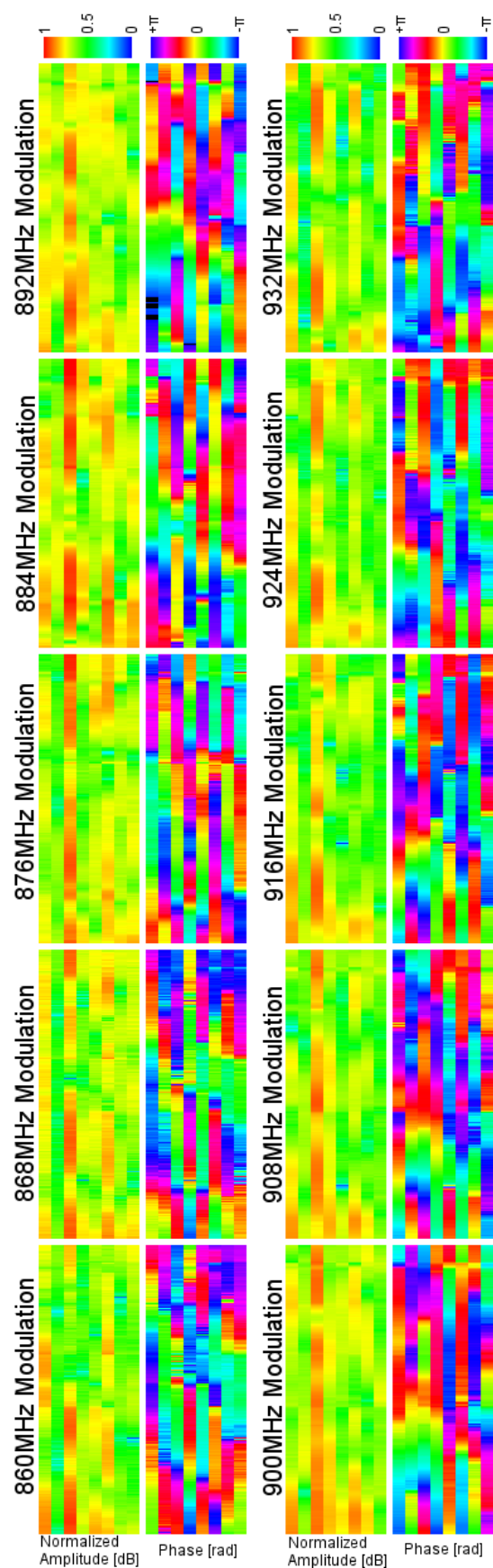


Fig. 13: Example of captured raw data showing normalized amplitude in dB and phase in rad for 10 modulation frequency points for 34GHz carrier wave (target position at 5cm).



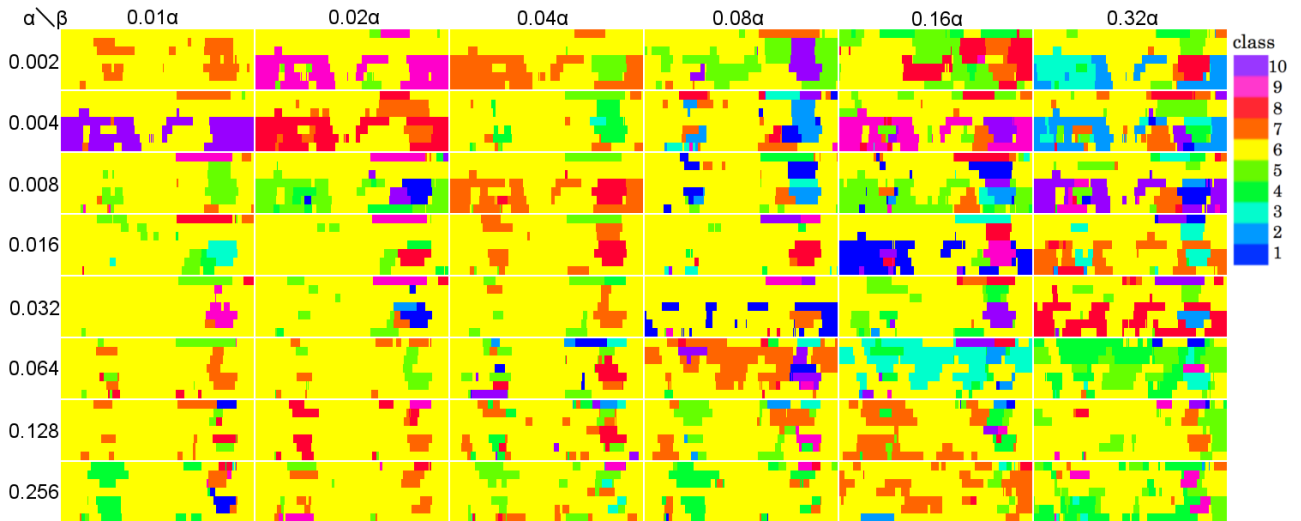


Fig. 14: Variation of the visualization results dependent on the self-organization parameters  $\alpha$  for the winner and  $\beta$  for the neighbors (target position at 5cm).

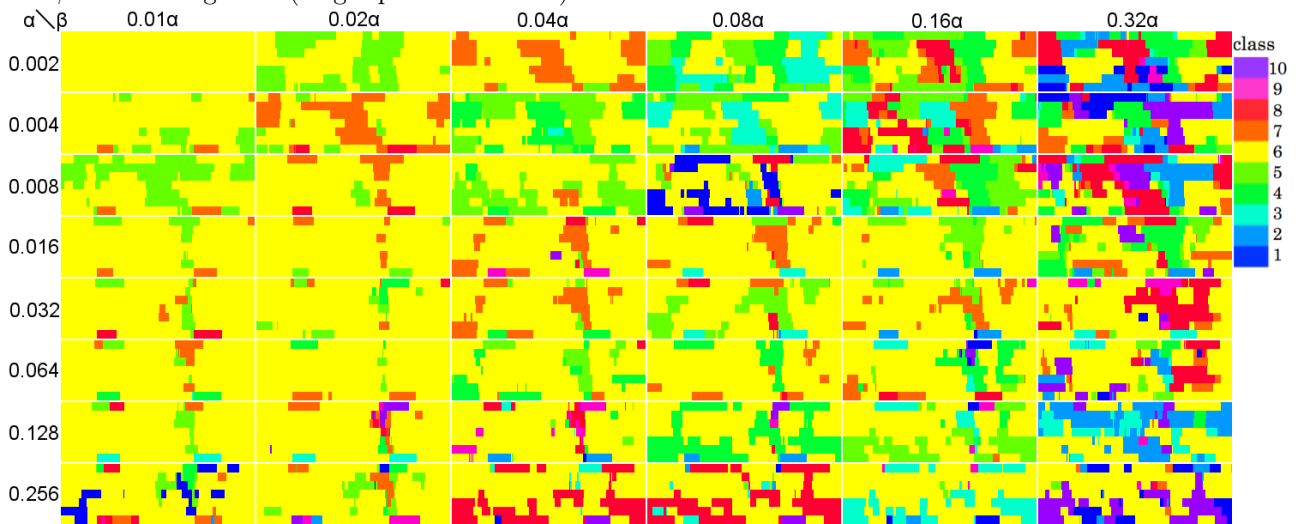


Fig. 15: Variation of the visualization results dependent on the self-organization parameters  $\alpha$  for the winner and  $\beta$  for the neighbors (target position at 25cm).

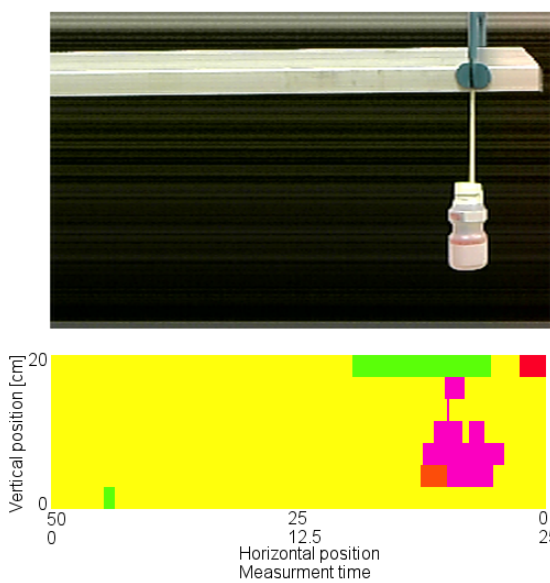


Fig. 16: Photo of the moving target (at 5cm) and the CSOM visualization result.

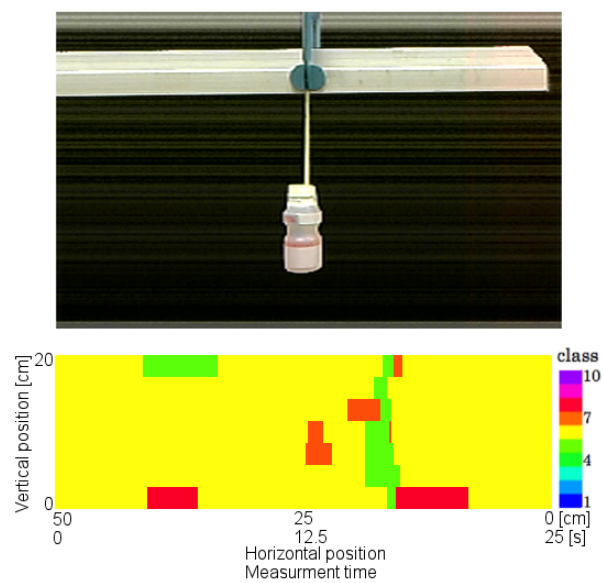


Fig. 17: Photo of the moving target (at 25cm) and the CSOM visualization result.

## 参考文献

- 1) A. Sasaki and T. Nagatsuma, "Millimeter-wave imaging using an electrooptic detector as a harmonic mixer," *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, vol. 6, no. 5, pp. 735–740, September/October 2000.
- 2) A. Mizutani, K. Sakakibara, N. Kikuma, and H. Hirayama, "Grating lobe suppression of narrow-wall slotted hollow waveguide millimeter-wave planar antenna for arbitrarily linear polarization," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 55, no. 2, pp. 313–320, February 2007.
- 3) S. Masuyama and A. Hirose, "Walled LTSA array for rapid, high spatial resolution, and phase sensitive imaging to visualize plastic landmines," *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, vol. 45, no. 8, pp. 2536–2543, August 2007.
- 4) D. Radenamad, T. Aoyagi, and A. Hirose, "High-sensitivity millimeter-wave imaging front-end using a low impedance linearly-tapered slot antenna," *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, vol. 59, no. 12, pp. 4868–4872, December 2011.
- 5) T. Hara and A. Hirose, "Plastic mine detecting radar system using complex-valued self-organizing map that deals with multiple-frequency interferometric images," *Neural Networks*, vol. 17, no. 8-9, pp. 1201–1210, November 2004.
- 6) A. Hirose, *Complex-Valued Neural Networks, 2nd Edition*. Heidelberg, Berlin, New York: Springer, 2012.
- 7) T. Aoyagi, D. Radenamad, Y. Nakano, and A. Hirose, "Complex-valued self-organizing map clustering using complex inner product in active millimeter-wave imaging," in *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN) 2010 Barcelona*. Barcelona: IEEE/INNS, July 2010, pp. 1346–1351.

# コンピュータショナルインテリジェンスの視点から見た無人帆走の課題

○真鍋秀朗, 橋完太 (工学院大学)

## Unsolved Issues of Unmanned Sailing from the View Point of Computational Intelligence

\*Hideaki Manabe and Kanta Tachibana (Kogakuin University)

**Abstract**— About the Unmanned Sailing, target survey, database construction of sail and rudder, and sailing fuzzy control are researched, but they are unsolved issues. Sailing ships which have no supply power are influenced by wind and wave, we have to estimate vector fields. To high accuracy, we are necessary to get hold of sea surface, the sky and into the sea conditions. Propulsive of sail is changed by the relative velocity between boat and wind; we need to predict the decision of course. We show the state and unsolved issues of unmanned sailing, and consider calculation intelligence method to resolve the issues.

**Key Words:** Sailing, Reinforcement Learning, Fuzzy Expert System

### 1 はじめに

無人帆走について、ベイズフィルタを用いた目標追跡<sup>1)</sup>や、船舶のファジィ制御<sup>2)</sup>、帆や舵のデータベース構築<sup>3)</sup>など研究がされているが、まだまだ解決すべき問題も多い。自ら動力を持たない帆船は風や波の影響を強く受けるため、それらベクトル場の予測をしなければならず、さらに高精度に予測するためには海表面だけでなく上空や海中の状態を把握する必要がある<sup>4)</sup>。また、帆に受けうる推進力は船と風との相対速度によって変化するため、未来を予測して進路を決める必要がある。本研究では無人帆走の現状と課題をまとめ、どのような計算知能手法が課題解決に有効かを考察する。

### 2 セーリングの概要と先行研究

本項ではセーリングの概要、デッドゾーンやアビームについての説明を 2.1 項で紹介する。2.2 項から 2.5 項では、帆船の自動操縦に関連する先行研究を紹介する。2.6 項では 2.2 項から 2.5 項で紹介した研究をまとめる。

#### 2.1 概要

セーリングの推進力は主に帆（セール）であり、セーリングとは帆を持った船を使用するスポーツやレジャーをいう。帆走は“洋上のチェス”と例えられることが多い。動力源を持たない帆船は風や波の力を利用しただけでしか帆走ができないため、どのようなコース取りをするか、その際にどの地点にどの方向からどれくらいの速度で入るか、などをその時々により予測して進まなければならない。

Fig. 1に示した縞線部分がデッドゾーンである。風が吹いて来る方向から見ておよそ左右45°までの部分をいい、帆走の際にデッドゾーンに進むことはできない。そのため、目的地に最短時間で移動できる経路は

最短距離の経路とは限らず、風を利用するためにあえてジグザグに移動した方が結果的に目的地に短時間で到着できることも多くある。

また、風が吹いて来る方向から90°、つまり真横から風を受けて帆走することをアビームといい、この場合に帆船は風を効率的に受けて比較的速く進む。一見、真後ろから風を受けた時が最も速く進むように思えるが、実際は風が後述の進行風と打ち消されるため、最も速く帆走できるわけではない。よって、セーリングにおいて効率的に進むためには、できるだけデッドゾーンに入ることを避け、アビームの状態を保ちながら帆走する必要がある。

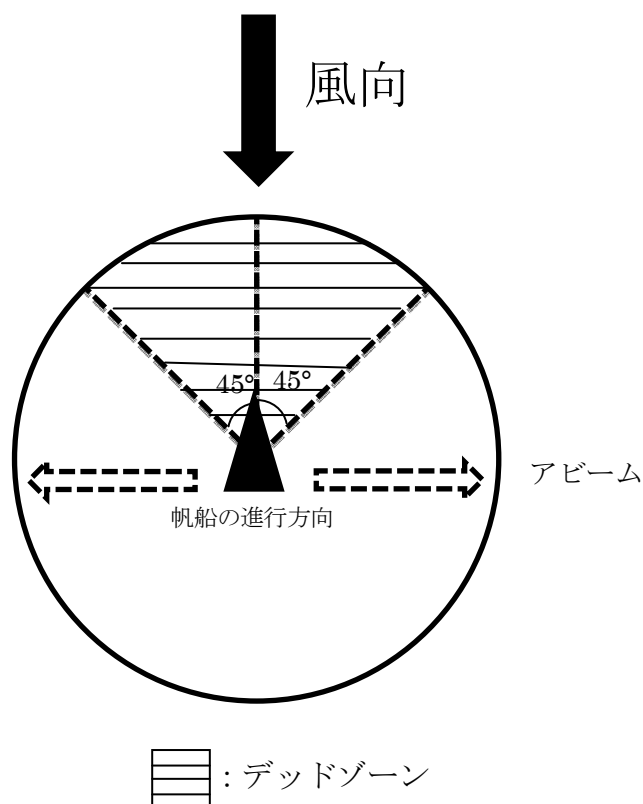


Fig. 1: 帆走におけるデッドゾーンとアビームの図

## 2.2 船型まわりの自由表面流の数値解析

セーリングヨットは定常状態であっても斜航、横傾斜をする。岩寄らの研究<sup>5)</sup>では、斜航及び横傾斜状態の流体力学的特性を評価することがその船型開発上重要な項目の一つである点に着目し、直立直進状態、斜航状態のセーリングヨット船型まわりの自由表面流の数値解析を行った。

## 2.3 PHDフィルタを使った物体の追跡方法

Gal と Zeitouni の研究<sup>1)</sup>は、海上での物体の追跡方法について、画像処理を使って分析をした。目標発見と追跡のためのアルゴリズムとして、Probability Hypothesis Density(PHD)ベイズフィルタを提案した。評価実験では、Mean Shift アルゴリズムという独自のアルゴリズムを使って画像の背景部分のノイズ除去を行い、帆船における物体追跡手法への実用化を目指した。

## 2.4 船舶自動航行ファジィエキスパートシステム(SAFES)

長谷川らの研究<sup>2)</sup>では、海上での船舶の運航の自動化と安全を考えるうえで重要な狭水路航行、複数船との衝突回避行動などを人間の判断機能に倣ったファジィ理論を用いて表現した。さらに、船長などの知識や経験の記述に便利なエキスパートシステムを組み込むことによって自動航行を実現するシステム(SAFES : Ship Auto-navigation Fuzzy Expert System)を開発した。

## 2.5 セーリング競技における第1マークまでの帆走時の戦略と戦術に関する調査研究

セーリング競技では風の強さによって重視される戦略や戦術が大きく異なってくる。高橋らの研究<sup>6)</sup>は、微風域、中風域、強風域をそれぞれ得意とする大学生選手が、第1マークまでの帆走時に重要視する戦略と戦術に関して、8つのカテゴリについてアンケート調査を行い、分析した。その結果、微風域と中風域を得意としている選手では、「風向」、「風速」、「潮流」、「対相手」、「スタート」、「自己能力」、「事前知識」が相対的に高値を示した。また、強風域を得意とする選手では、「風向」、「風速」、「波高」、「スタート」、「自己能力」、「事前知識」が高いという結果になった。以上の結果から、微風域、中風域、強風域のいずれを得意としている選手とも「風向」「風速」を重要視しており、風や波の状況は帆走においてとても重要な影響を与えることが分かる。

## 2.6 先行研究のまとめ

以上の先行研究をまとめると、2.2の研究は帆船のまわりの自由表面流の数値解析を行っており、ハードウェアとしての帆船を造るための研究である。2.3の研究は物体の追跡方法を提案し、帆船における目標物の追跡を目指した。2.4の研究は船舶自動航行においてより複雑な情報処理である、狭水路航行や他船との衝突回避を行った。2.3と2.4の研究では自動航行システムという点では本研究と同じ分野ではあるが、帆船に限らず船舶一般(推進源を持つ船も含む)に関する研究である。2.5の研究では帆船がすでに完成されており、実際に帆走をしていく上での帆船の進め方や戦略などが研究されているため、人間がどのように帆船を操作していくかという戦略的な要素が強い研究である。

本研究では、2.4の研究と2.5の研究の間を埋めるような研究を考える。つまり、本来なら人間が行う帆船の進め方や戦略などを機械に行わせる研究である。先行研究では帆走においての人間の戦略や帆船まわりの波の数値解析などが多く、人間の操作を帆船自体に行わせる研究はほとんどなされていない。帆船の自動操縦はまだ研究が進んでいない分野であるといえる。

## 3 無人帆走における課題

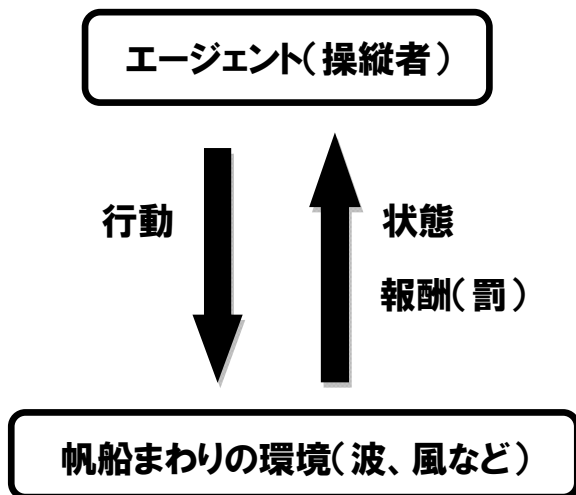
本項では無人帆走における課題について述べる。無人帆走は時々刻々と変化していく環境の中で操縦者がその状況に応じた操作をしなければならない。そのため、ある環境におけるエージェントがその環境と相互作用しながら学習を行う強化学習を利用できるのではないかと考えた。また、ファジィエキスパートシステムで風や波の状況、帆船の速度など、人間の知識を機械に実装させ、帆船の自動操縦を機械化できると考えた。3.1項では強化学習を用いた手法での課題、3.2項ではファジィエキスパートシステムを用いた手法での課題を述べる。

### 3.1 強化学習を用いた手法での課題

強化学習は、有限の状態と有限の行動を持つゲームの戦略などの有限マルコフ決定過程における問題を解くために適用されてきたが、近年では、より複雑な状態と行動を持つ実世界へと、その適用範囲を広げる研究が進められている。特に、ロボットの運動制御や自律制御の分野での研究が活発になっており、歩行の獲得を代表とする複雑な制御問題にも適用されている。しかし、実世界における問題は、連続した時間が流れていることや、状態や行動の数が無限であること、環境に多くのノイズが含まれることで、有限マルコフ決定過程における問題に比べると、非常に難しい問題であることが分かっている<sup>7)</sup>。

また、強化学習とは機械学習などの教師あり学習とは異なるものであり、相互作用的な目標探求型エージェントを前提とするものである。強化学習の主な構成要素は方策、報酬関数、価値関数、環境のモデルの4つである<sup>8)</sup>。

自動帆走に強化学習手法を適用する場合、概略図は Fig. 2 のようになる。エージェントが帆船の操縦者、環境にあたる部分が帆船の状態と風や波の状況を指すことになり、帆船が置かれている環境に応じて報酬や罰を与え、累積報酬の期待値が大きくなるよう行動を選択する。具体的にいえば、現在の地点から目的地にたどり着くまでの確率を計算し、選択された行動によりその確率が高くなれば報酬を与え、確率が低くなれば罰を与えるものであり、これを機械が自ら学習していく手法である。

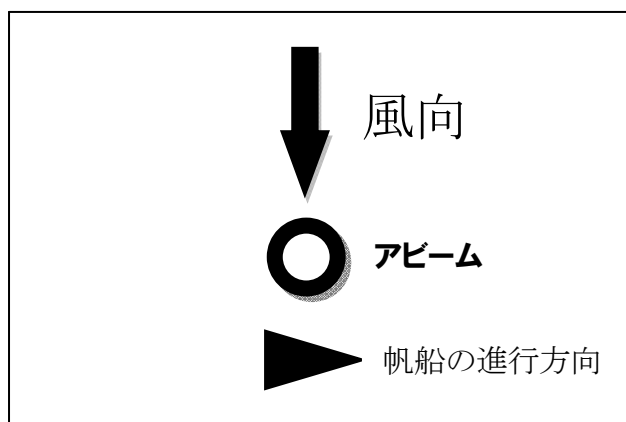
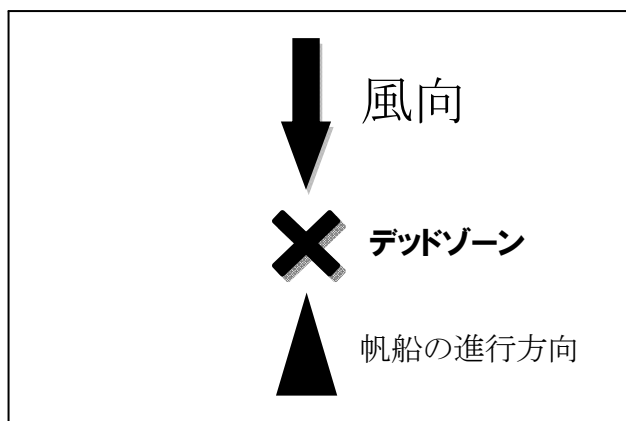


※行動により目的地までの到達確率が高くなれば報酬を、目的地までの到達確率が低くなれば罰を与える。

Fig. 2: 帆船操縦における強化学習の簡易モデル

しかし、この手法を帆船自動操縦に取り入れる際の問題点は、風や波の大きさが、帆船の置かれている状況により報酬にも罰にも捉えられる点である。例えば Fig. 3 のように帆船が北へ向かって進む場合、北から南へ風が吹く際にはデッドゾーンから風が吹くため、帆船は全く進まない状況になってしまう。しかし、帆船が西から東へ進む場合、同じように北から南へ風が吹く際には、真横から風を受けて帆走するため、デッドゾーンから風を受けて進む場合よりも圧倒的に速く進む。つまり、同じ方角から風が吹いてエージェントが同じ行動を起こしたとしても、目標方向によって進み方が大きく変わるため、風の向きだけでは報酬を

えるか罰を与えるかを判断できない。

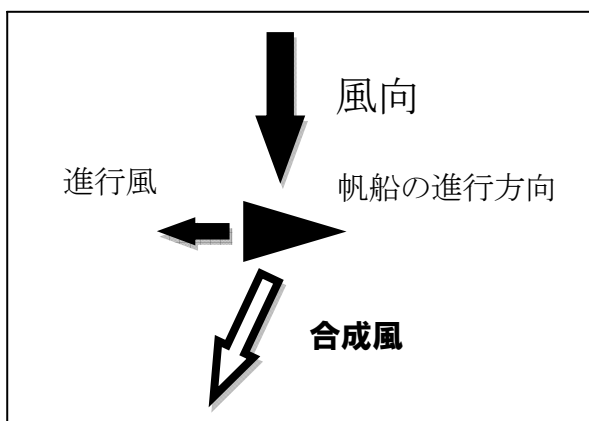


※同じ方向から同じ強さの風が吹いても、帆船の進行方向により、進み方が異なる。

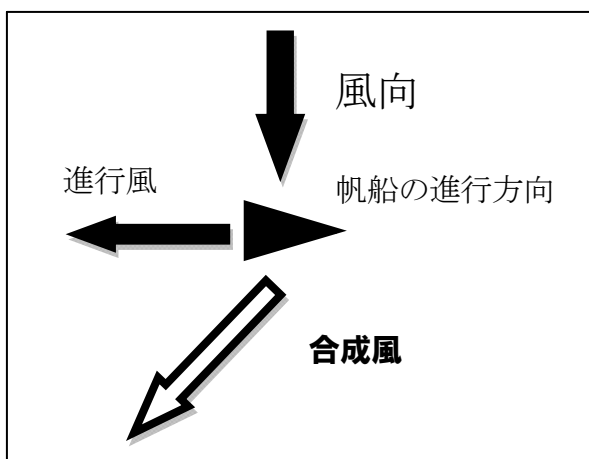
Fig. 3: 帆船の進行方向による風の影響の違い

また、これは帆船の向きだけでなく帆船の速度についても同じである。Fig. 4 に示すように、風向と帆船の進行方向が共に同条件だとしても、帆船の速度が遅い場合と速い場合とで、帆船が風から受ける影響が異なる。速度が遅い場合は帆船が受ける進行風は小さくなり、合成風における進行風の影響は小さい。一方、速度が速い場合は帆船が受ける進行風は大きくなり、合成風における進行風の影響は大きくなる。そのため、この場合も風の向きだけでは報酬を与えるか罰を与えるかを判断できない。

### ・帆船の速度が遅い場合



### ・帆船の速度が速い場合



※帆船の進行方向と風の強さ、向きが同じでも、帆船の速度によって、合成風の向きと強さが異なる。

Fig. 4: 帆船の速度による合成風の影響の違い

### 3.2 ファジィエキスパートシステムを用いた手法での課題

2.5 項で述べた長谷川らによる研究では、狭水路航行、他の船との衝突の回避などの安全を考える上でのファジィエキスパートシステムを提案していた。これを帆船に取り入れる際に生じる課題は、ルールを作成する作業は全て人間が行わなければならないことである。帆走は自らの帆船の向きだけでなく、風向や強さ、周辺の波高や波長、帆船の速度や天候など多数の要素が影響するため、これら全てについて人間が手作業でルールを作成していくのは非常に難しい。

帆船の自動操縦は無人で帆走するため、機械が自ら

そのルールを取得して記憶し、その状況に応じて最適な行動を取ることが必要となる。

## 4 まとめ

本論文では、コンピュータショナルインテリジェンスの視点から見た帆船の無人帆走についての現状と課題について述べた。

今回紹介した課題は、強化学習を用いたものとファジィエキスパートシステムを用いたものの2つである。どちらの分野もそれぞれの手法自体に関する研究はなされているが、帆船に実装するという点ではほとんど研究されていない。先行研究でも船舶に関する研究や帆走における戦略などの研究はされているが、自ら動力を持たない帆船に関する分野の研究は未だほとんどなされていない状況である。

今回は無人での帆船自動操縦における課題を述べたが、まだ実験等はしていない状況である。これからこれらの課題を解決するような手法を提案していき、実験・分析をして帆船の自動操縦の実装を目指していきたい。

## 参考文献

- 1) Oren Gal, Eran Zeitouni: Tracking Objects Using PHD Filter for USV Autonomous Capabilities, *Robotic Sailing 2012*, **1**, 3-12, (2012)
- 2) 長谷川, 村松, 渡部, 上月, 小峰: 船舶自動航行ファジィエキスパートシステム(SAFES), *日本造船学会秋季講演会*, **166**, 445-451, (1989)
- 3) Lars Hertel, Alexander Schlaefer: Data Mining for Optimal Sail and Rudder Control of Small Robotic Sailboats, *Robotic Sailing 2012*, **1**, 38-48, (2012)
- 4) 橋: Geometric learning ~セーリング戦略の強化学習, *統計数理研究所共同研究レポート*, **309**, 27-30, (2014)
- 5) 岩寄, 鈴木, 甲斐: パネル法によるセーリングヨット船型まわりの自由表面流の数値解析 - 第1報: 直立直進及び斜航状態の計算 -, *関西造船協会誌*, **230**, 65-74, (1998)
- 6) 高橋, 萩原, 山本: セーリング競技における第1マークまでの帆走時の戦略と戦術に関する調査研究 ~全日本学生ヨット選手権大会出場者を対象として~, *スポーツパフォーマンス研究*, **2**, 131-142, (2010)
- 7) 柏村, 上野, 辰巳: 強化学習のための Particle Filter を用いた連続行動空間表現, *The 22<sup>nd</sup> Annual Conference of the Japanese Society for Artificial Intelligence*, **2**, 1-4, (2008)
- 8) Richard S. Sutton, Andrew G. Barto, *Reinforcement Learning*, 3-7, 森北出版株式会社, (2000)

# Cayley-Dickson 線形システムのための実同型変換と超複素オンライン学習への応用

○溝口 毅彦 山田 功 (東京工業大学)

## An Algebraic Real Translation of Cayley-Dickson Linear Systems with Applications to Hypercomplex Online Learning

\*T. Mizoguchi and I. Yamada (Tokyo Institute of Technology)

**Abstract**— The  $m$ -dimensional Cayley-Dickson number system is a standard extension of real, complex, quaternion, octonion and sedenion etc. In this paper, we introduce a systematic algebraic translation of the Cayley-Dickson valued linear systems into a real vector valued linear model. This translation is designed by using jointly two isomorphisms between real vector spaces and enables us to straightforwardly apply the well established schemes in real domain to problems for the hypercomplex linear model. We also present useful algebraic properties of the proposed translation. As an example of many potential applications through the proposed algebraic translation, we present  $\mathbb{A}_m$ -APSM (adaptive projected subgradient method) both linear and nonlinear hypercomplex online learning problems. Numerical examples show that the proposed hypercomplex learning algorithms outperform existing algorithms.

**Key Words:** Hypercomplex number, Linear system, Online learning

### 1 序論

複素数や四元数などの超複素数で表現される信号は通信工学、風速予測<sup>1)</sup>、音響システムの雑音除去<sup>2)</sup>、コンピュータグラフィクス<sup>3)</sup>、ロボティクス<sup>4)</sup>などの工学の分野で自然に現れる。信号処理の分野では  $m$  次元の Cayley-Dickson 数 (C-D 数) を効果的に活用することが盛んに行われるようになった。C-D 数  $\mathbb{A}_m$  は実数 ( $m = 1$ )、複素数  $\mathbb{C}$  ( $m = 2$ )、四元数  $\mathbb{H}$  ( $m = 2^2$ )、八元数  $\mathbb{O}$  ( $m = 2^3$ )、十六元数  $\mathbb{S}$  ( $m = 2^4$ ) などを一例に含む超複素数の標準的な体系である。

信号処理への C-D 数の応用では、往々にして超複素ベクトルの最適化の枠組みにおいて何らかのコスト関数の微分を評価する必要がある。しかしながら、超複素数領域であってもコスト関数は実数値に限定されるため、1 変数超複素関数の意味で正則関数とはならない。例えば複素数の場合では Cauchy-Riemann 方程式が成立しない。そこで、特定の超複素数領域に対して特別な実微分計算則の利用が提唱されてきた。例えば複素数領域では Wirtinger calculus<sup>5)</sup> ( $\mathbb{C}\mathbb{R}$ -calculus<sup>6)</sup>) が、四元数領域では  $\mathbb{H}\mathbb{R}$ -calculus<sup>7)</sup> が適応フィルタなどの超複素信号処理問題を解決するために特別に定義され、用いられてきた<sup>7, 8)</sup>。しかしながら、これらの特別な微分計算則は C-D 数の次元の増加とともに複雑になっていく上、一般の C-D 数領域で実微分計算則は確立されていない。さらに四元数では掛け算の交換則が、八元数では結合則が失われるように、高次元の超複素数はその次元が上がるほど代数的な基本性質が失われていくため、C-D 数において発展的な最適化・学習アルゴリズムの設計には大きな困難が立ちはだかっていた。

小文は最近筆者らが発表した文献<sup>9)</sup>の1のエッセンスをわかりやすく紹介することを目的としている。まず、Cayley-Dickson 線形システム (C-D 線形システム) と実線形システムとの関係を解明するため、2つの同型写

像  $\widehat{(\cdot)}$  と  $\widetilde{(\cdot)}$  を導入する。そして、それらの同型写像を組み合わせることにより実現される C-D 線形システムの代数的変換方法を紹介する。提案変換法により、いかなる C-D 線形システムも等価の実線形システムに変換することができる。このことは、提案同型写像の持つ基本的な代数的性質を解明することによって示すことができ、C-D 線形システムと等価の実線形システムが直ちに得られるだけでなく、C-D 線形システムに関する最適化・学習問題を特別な微分計算則を用いることなく解決することを可能にする。

提案変換法の超複素オンライン学習への応用例として、小文では超複素オンライン学習アルゴリズム  $\mathbb{A}_m$ -適応射影劣勾配法 ( $\mathbb{A}_m$ -adaptive projected subgradient method,  $\mathbb{A}_m$ -APSM) を紹介する。 $\mathbb{A}_m$ -APSM は適応射影劣勾配法<sup>10, 11)</sup> (APSM) を提案変換法を経由し適用領域を C-D 領域に拡張することで導くことができ、 $\mathbb{A}_m$ -NLMS 法、 $\mathbb{A}_m$ -アフィン射影法 ( $\mathbb{A}_m$ -APA)、 $\mathbb{A}_m$ -適応並列射影劣勾配法 ( $\mathbb{A}_m$ -APSP) といった射影に基づく超複素オンライン学習アルゴリズムを幅広く含む。さらにカーネルトリック適用することにより、これらの提案アルゴリズムは非線形オンライン学習アルゴリズムへ自然に拡張することができる。

数値例では  $\mathbb{C}$ 、 $\mathbb{H}$ 、 $\mathbb{O}$  といった代表的な C-D 値の線形システム同定問題や非線形チャンネル等化問題において、提案する超複素オンライン学習アルゴリズムが既存のアルゴリズムの性能を大きく上回ることを確認している。

### 2 数学的準備

#### 2.1 Cayley-Dickson 数

$\mathbb{N}$  と  $\mathbb{R}$  をそれぞれ非負整数全体の集合と実数全体の集合とする。 $m$  次元の超複素数  $\mathbb{A}_m$  ( $m \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$ ) を、複素数の虚数単位  $i_1, \dots, i_m$  を固定しこれらを基底として表現されるベクトル

$$a := a_1 i_1 + a_2 i_2 + \dots + a_m i_m \in \mathbb{A}_m, a_1, \dots, a_m \in \mathbb{R}$$

<sup>1</sup>第1著者 (現在、日本電気 情報・ナレッジ研究所に勤務) が東京工業大学大学院理工学部の成男手塚フェロニクス研究会 (2014年7月1日-2日・神奈川)

全体からなる集合として定義する<sup>12)</sup>。ここで、 $i_1 = 1$  は単位元を表す。すべての超複素数は(1)の形式で一意に表現することができる。また、乗積表はすべての虚数単位と他の虚数単位あるいは自分自身との積を定義する(たとえば、 $\mathbb{A}_2 (=:\mathbb{C})$ では乗積表は  $i_1^2 = 1, i_2^2 = -1, i_1 i_2 = i_2 i_1 = i_2$  となる)。2つ超複素数  $a, b \in \mathbb{A}_m$  の加算は以下のような可換二項演算として定義される。

$$a+b := (a_1+b_1)i_1+(a_2+b_2)i_2+\cdots+(a_m+b_m)i_m \in \mathbb{A}_m$$

ここで、 $b := b_1 i_1 + b_2 i_2 + \cdots + b_m i_m \in \mathbb{A}_m, b_1, \dots, b_m \in \mathbb{R}$  とする。超複素数が(1)で一意に表現されることから、2つの超複素数  $a, b$  の乗算

$$\begin{aligned} ab &= (a_1 i_1 + \cdots + a_m i_m)(b_1 i_1 + \cdots + b_m i_m) \\ &:= \sum_{k=1}^m \sum_{\ell=1}^m a_k b_\ell i_k i_\ell \in \mathbb{A}_m \end{aligned} \quad (2)$$

は乗積表から一意に決まる。また、超複素数  $a$  の共役  $a^*$  を

$$a^* := a_1 i_1 - a_2 i_2 - \cdots - a_m i_m \quad (3)$$

と定義する。小文では、Cayley-Dicksonの二重化<sup>12, 13)</sup>(単に二重化,あるいはC-D procedure, C-D constructionなどとも呼ばれる)によって再帰的に構成される超複素数を考える。二重化は数の世界を拡張する標準的な方法の1つである。この方法は実数  $\mathbb{R}$  を複素数  $\mathbb{C}$  に、複素数を四元数  $\mathbb{H}$  に、四元数  $\mathbb{H}$  を八元数(Cayley数)  $\mathbb{O}$  に、八元数を十六元数  $\mathbb{S}$  に拡張するのに用いられる。二重化により、 $m$ 次元の超複素数  $\mathbb{A}_m$  は以下のように  $\mathbb{A}_{2m}$  に拡張される。

$$z := a + b i_{m+1} \in \mathbb{A}_{2m}, \quad a, b \in \mathbb{A}_m$$

ここで、 $i_{m+1} \notin \mathbb{A}_m$  は二重化の際に追加される新たな虚数単位で  $i_{m+1}^2 = -1, i_1 i_{m+1} = i_{m+1} i_1 = i_{m+1}$  を満たし、すべての  $v = 2, \dots, m$  に対して  $i_v i_{m+1} = -i_{m+1} i_v =: i_{m+v}$  を満たす。さらに、二重化された  $\mathbb{A}_{2m}$  における乗算は  $\mathbb{A}_m$  における乗算を用いることで

$$(a + b i_{m+1})(c + d i_{m+1}) := (ac - d^* b) + (ad + b c^*) i_{m+1} \in \mathbb{A}_{2m} \quad a, b, c, d \in \mathbb{A}_m \quad (4)$$

と計算され、これにより  $\mathbb{A}_{2m}$  の乗積表は一意決定される(詳しくは<sup>9)</sup>のRemark 1-4)を参照されたい)。二重化の一例として、実数  $\mathbb{R} (=:\mathbb{A}_1)$  は  $i_2 := i (i \in \mathbb{C}, i^2 = -1)$  を用いることで二重化により複素数に拡張される。二重化の過程からも明らかなように、 $\mathbb{A}_m$  における  $m$  は  $2^n (n \in \mathbb{N})$  の形式に制限されることに注意されたい。実数から帰納的に構成される超複素数の体系を、小文ではCayley-Dickson数(C-D数)と呼ぶ<sup>2)</sup>。C-D数に現れる虚数単位は多くの特徴的な性質を持つ。詳しくは<sup>9)</sup>に譲るが、特に重要なのはすべての  $\alpha, \beta \in \{2, \dots, m\}$  に対して  $i_\alpha^2 = -1, i_\alpha i_\beta = -i_\beta i_\alpha (\alpha \neq \beta)$  が成り立つ

<sup>2)</sup>よく知られている他の超複素数の1つとしては、Clifford代数<sup>14)</sup>が挙げられる。Clifford代数の次元も  $2^n$  の形式になるが、構成方法(例えば<sup>13)</sup>を参照)の違いから2つの虚数単位の積はC-D数と異なる。 $\mathbb{R}$ や $\mathbb{C}$ 、 $\mathbb{H}$ はClifford代数の一例でもあるが、 $\mathbb{O}$ やより高次元のC-D数は自己加減乗除可換代数の例には当てはまらない(2014年7月1日・2日・神奈川)

ことである。この性質によりすべての  $a \in \mathbb{A}_m$  および  $a^* \in \mathbb{A}_m$  に対して、 $aa^* = \sum_{\ell=1}^m a_\ell^2 \geq 0$  が保証されるため、C-D数  $a$  の絶対値は

$$|a| := \sqrt{aa^*}$$

と定義される。

**例 1.** (a) (四元数  $\mathbb{H}$ ) 四元数  $\mathbb{H} (=:\mathbb{A}_4)$  は複素数  $\mathbb{C} (=:\mathbb{A}_2)$  を二重化することにより構成され、

$$q = q_1 + q_2 i + q_3 j + q_4 \kappa \in \mathbb{H}, \quad q_1, q_2, q_3, q_4 \in \mathbb{R}$$

によって表現される。 $m = 4, i_1 = 1, i_2 = i, i_3 = j, i_4 = \kappa$  とすることで乗積表は以下ようになる。

$$\begin{aligned} ij &= -ji = \kappa, \quad j\kappa = -\kappa j = i, \quad \kappa i = -i\kappa = j, \\ i^2 &= j^2 = \kappa^2 = -1 \end{aligned}$$

このことは乗算の非可換性を例示している。

(b) 八元数  $\mathbb{O}$  は四元数  $\mathbb{H}$  を二重化することにより構成される。 $\mathbb{O}$  の乗算には可換性も結合性も保証されないことに注意する。八元数の具体的な乗積表は例えば<sup>13)</sup>を参照されたい。

## 2.2 表記

実数の場合と同様に、超複素数の  $N$ 次元ベクトルを  $\mathbb{A}_m^N := \{[x_1, \dots, x_N]^T | x_\ell \in \mathbb{A}_m (\ell = 1, \dots, N)\}$   $\forall N \in \mathbb{N} \setminus \{0\}$  と定義する。ここで  $(\cdot)^T$  は転置を表す。また、超複素ベクトルに対する2つの写像をそれぞれ  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle_{\mathbb{A}_m^N} := \mathbf{x}^H \mathbf{y} \in \mathbb{A}_m, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{A}_m^N, \|\mathbf{x}\|_{\mathbb{A}_m^N} := \langle \mathbf{x}, \mathbf{x} \rangle_{\mathbb{A}_m^N}^{1/2} \geq 0, \forall \mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N$  と定義する。 $(\cdot)^H$  はベクトルや行列のエルミート転置である(たとえば  $\mathbf{x} := [x_1, \dots, x_N]^T \in \mathbb{A}_m^N (x_1, \dots, x_N \in \mathbb{A}_m)$  に対して  $\mathbf{x}^H := [x_1^*, \dots, x_N^*]$  となる)。2つの超複素ベクトル  $\mathbf{x}, \mathbf{y} := [y_1, \dots, y_N]^T \in \mathbb{A}_m^N$  の加算を  $\mathbf{x} + \mathbf{y} := [x_1 + y_1, \dots, x_N + y_N]^T \in \mathbb{A}_m^N$  と定義する。 $S$  を  $\mathbb{R}, \mathbb{C}$  または  $\mathbb{A}_m (m \geq 4)$  のいずれかとし、 $S$  の要素をスカラーと呼ぶ。スカラー  $\alpha \in S$  に対して超複素ベクトル  $\mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N$  のスカラー倍を  $\alpha \mathbf{x} := [\alpha x_1, \dots, \alpha x_N]^T \in \mathbb{A}_m^N$  と定義すれば、 $\alpha \mathbf{x} + \beta \mathbf{y} \in \mathbb{A}_m^N, \forall \alpha, \beta \in S, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{A}_m^N$  が成り立つ。これらの性質はベクトルを行列に置き換えても成立する(詳しくは<sup>9)</sup>を参照)。 $S := \mathbb{R}$  または  $\mathbb{C}$  のとき、 $\mathbb{A}_m^N$  は  $S (=:\mathbb{R})$  上のベクトル空間となる。一方  $S := \mathbb{A}_m (m \geq 4)$  のとき、 $S$  は非可換であり、さらに  $\mathbb{A}_m (m \geq 8)$  は(非結合的)分配多元環<sup>15)</sup>であるため、スカラー  $S (=:\mathbb{A}_m)$  上の空間  $\mathbb{A}_m^N$  は厳密な意味でベクトル空間にはならないことに注意する。また、空でない凸集合<sup>3)</sup>  $C \subset \mathbb{A}_m^N$  に対しても、距離射影  $P_C^{\mathbb{A}_m^N} : \mathbb{A}_m^N \rightarrow C$  はベクトル  $\mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N$  を  $d_{\mathbb{A}_m^N}(\mathbf{x}, C) := \|\mathbf{x} - P_C^{\mathbb{A}_m^N}(\mathbf{x})\|_{\mathbb{A}_m^N} = \min_{\mathbf{y} \in C} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{\mathbb{A}_m^N}$  となるようなベクトル  $P_C^{\mathbb{A}_m^N}(\mathbf{x}) \in C$  に一意に対応付ける。

## 3 提案変換法

本節では、超複素ベクトルや超複素行列の代数的変換方法を紹介する。これらの変換法は超複素数  $\mathbb{A}_m$  と多次元実ベクトル  $\mathbb{R}^m$  との対応関係を利用して設計されている。

<sup>3)</sup>  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in C, \forall \nu \in (0, 1), \nu \mathbf{x} + (1 - \nu) \mathbf{y} \in C$  を満たすとき、集合  $C \subset \mathbb{A}_m^N$  は凸であるという。PG0008/14/0000-0001 © 2014 SICE



### 3.1 超複素線形システム

小文では以下のような Cayley-Dickson 線形システムを考える。

$$\mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (5)$$

ここで、 $\mathbf{y}, \mathbf{b} \in \mathbb{A}_m^M$ ,  $\mathbf{x} := \sum_{\ell=1}^m \mathbf{x}^{\ell} i_{\ell} \in \mathbb{A}_m^N$  ( $\mathbf{x}^{\ell} \in \mathbb{R}^N$ ),  $\mathbf{A} := \sum_{\ell=1}^m \mathbf{A}^{\ell} i_{\ell} \in \mathbb{A}_m^{M \times N}$  ( $\mathbf{A}^{\ell} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ ) である。

**注意 1** (広義線形複素モデル).  $\mathbf{z} \in \mathbb{C}^N$  と  $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^M$  の関係が  $\Phi, \Psi \in \mathbb{C}^{N \times M}$  を用いて

$$\begin{aligned} \mathbf{y} &= \Phi \mathbf{z} + \Psi \mathbf{z}^* + \mathbf{b} \\ &= [\Phi, \Psi][\mathbf{z}^{\top}, \mathbf{z}^H]^{\top} + \mathbf{b} \end{aligned} \quad (6)$$

と表せるとき (ただし  $\mathbf{z}^* := (\mathbf{z}^H)^{\top}$ ), (6) の形式は広義線形複素システム (widely linear complex system) [16, 17, 18] と呼ばれ, 複素 2 次統計量を利用するのに都合のよい表現であることから広く用いられている。 $\mathbf{x} = [\mathbf{z}^{\top}, \mathbf{z}^H]^{\top}$  とすることで (6) の 2 番目の式は明らかに (5) の形式で表現することができる。広義線形複素システムの四元数への拡張もされている [19]。

### 3.2 提案同型変換法

超複素線形システムの 2 つの実同型変換を紹介する。線形システム (5) に対して, 超複素ベクトルや行列の実数値のベクトルや行列への自明な対応付け (写像) は

$$\widehat{(\cdot)} : \mathbb{A}_m^{M \times N} \rightarrow \mathbb{R}^{mM \times mN} : \mathbf{A} \mapsto \widehat{\mathbf{A}} := \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{A}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{A}_m \end{bmatrix} \quad (7)$$

と表現できる。この対応付けは超複素ベクトルや行列の実部とすべての虚部を行方向につなげるだけである。この写像の逆変換は,

$$\widetilde{(\cdot)} : \mathbb{R}^{mM \times mN} \rightarrow \mathbb{A}_m^{M \times N} : \widehat{\mathbf{A}} \mapsto \mathbf{A} \quad (8)$$

のように与えられる。しかし  $\widehat{(\cdot)}$  と  $\widetilde{(\cdot)}$  だけで行列とベクトルの乗算  $\mathbf{A}\mathbf{x}$  を実数領域に対応付けることは困難である。そこで以下の非自明な写像を導入する。

$$\begin{aligned} \widetilde{(\cdot)} : \mathbb{A}_m^{M \times N} &\rightarrow \mathbb{R}^{mM \times mN} : \\ \mathbf{A} \mapsto \widetilde{\mathbf{A}} &:= [\mathbf{L}_M^{(1)\top} \widehat{\mathbf{A}}, \mathbf{L}_M^{(2)\top} \widehat{\mathbf{A}}, \dots, \mathbf{L}_M^{(m)\top} \widehat{\mathbf{A}}] \end{aligned} \quad (9)$$

ここで  $\mathbf{L}_M^{(\ell)} \in \mathbb{R}^{mM \times mM}$  ( $\ell = 1, \dots, m$ ) は  $m$  次元超複素数  $\mathbb{A}_m$  に対して定義できる実行列

$$\mathbf{L}_M^{(\ell)} = \begin{bmatrix} \delta_{1,1}^{(\ell)} \mathbf{I}_M & \delta_{1,2}^{(\ell)} \mathbf{I}_M & \cdots & \delta_{1,m}^{(\ell)} \mathbf{I}_M \\ -\delta_{2,1}^{(\ell)} \mathbf{I}_M & -\delta_{2,2}^{(\ell)} \mathbf{I}_M & \cdots & -\delta_{2,m}^{(\ell)} \mathbf{I}_M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\delta_{m,1}^{(\ell)} \mathbf{I}_M & -\delta_{m,2}^{(\ell)} \mathbf{I}_M & \cdots & -\delta_{m,m}^{(\ell)} \mathbf{I}_M \end{bmatrix}, \quad (10)$$

であり,  $\mathbf{I}_M$  は  $M$  次元の単位行列,

$$\delta_{\alpha,\beta}^{(\gamma)} := \begin{cases} 1 & (\text{if } i_{\alpha} i_{\beta} = i_{\gamma}), \\ -1 & (\text{if } i_{\alpha} i_{\beta} = -i_{\gamma}), \\ 0 & (\text{otherwise}). \end{cases} \quad (11)$$

**例 2.** 四元数  $\mathbb{H}$  の場合,  $\mathbf{L}_M^{(\ell)}$  ( $\ell \in \{1, 2, 3, 4\}$ ) は以下のようになる。

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_M^{(1)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_M & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_M \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_M^{(2)} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I}_M \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_M & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \\ \mathbf{L}_M^{(3)} &= \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_M & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_M \\ -\mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_M^{(4)} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I}_M \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & -\mathbf{I}_M & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ -\mathbf{I}_M & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

ここで  $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{M \times M}$  は  $M \times M$  の零行列である。

### 3.3 代数的性質

C-D 数の虚数単位が持つ性質から, 変換  $\widehat{(\cdot)}$ ,  $\widetilde{(\cdot)}$ , (10) で定義された行列  $\mathbf{L}_M^{(\ell)}$  や (11) における  $\delta_{\alpha,\beta}^{(\gamma)}$  の様々な代数的性質が解明されている [9]。これらの性質を用いることで, C-D 値のベクトル・行列と実数値ベクトル・行列の対応付けを示す以下の重要な定理を得ることができる。

**定理 1** (実数値ベクトルと C-D 値ベクトル・行列の代数的対応関係). 超複素数  $\mathbb{A}_m$  が C-D 数であるとき,  $\widehat{(\cdot)}$ ,  $\widetilde{(\cdot)}$  に対して以下の関係が成立する。

1.  $\widehat{(\mathbf{A} + \mathbf{B})} = \widehat{\mathbf{A}} + \widehat{\mathbf{B}}$ ,  $\widehat{(\alpha \mathbf{A})} = \alpha \widehat{\mathbf{A}}$  かつ  $\widetilde{(\mathbf{A} + \mathbf{B})} = \widetilde{\mathbf{A}} + \widetilde{\mathbf{B}}$ ,  $\widetilde{(\alpha \mathbf{A})} = \alpha \widetilde{\mathbf{A}}$  ( $\forall \mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{A}_m^{M \times N}$ ,  $\forall \alpha \in \mathbb{R}$ )
2.  $\widetilde{(\mathbf{A}^H)} = \widetilde{\mathbf{A}}^{\top}$  ( $\mathbf{A} \in \mathbb{A}_m^{M \times N}$ ), ただし  $(\sum_{\ell=1}^m \mathbf{A}^{\ell} i_{\ell})^H := \mathbf{A}_1^{\top} i_1 - \sum_{\ell=2}^m \mathbf{A}^{\ell} i_{\ell}^{\top}$
3.  $\widehat{(\mathbf{A}\mathbf{B})} = \widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}}$  ( $\forall \mathbf{A} \in \mathbb{A}_m^{M \times N}$ ,  $\forall \mathbf{B} \in \mathbb{A}_m^{N \times L}$ )
4.  $\widehat{(\mathbf{A}\mathbf{x})} = \widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{x}}$  ( $\forall \mathbf{A} \in \mathbb{A}_m^{M \times N}$ ,  $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N$ )
5.  $\widehat{(\mathbf{x}^H \mathbf{y})} = \widehat{\mathbf{x}}^{\top} \widehat{\mathbf{y}}$  ( $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{A}_m^N$ )
6.  $\|\mathbf{x}\|_{\mathbb{A}_m^N} = \|\widehat{\mathbf{x}}\|_{\mathbb{R}^{mN}}$  ( $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N$ )
7. いかなる閉凸集合  $C \subset \mathbb{A}_m^N$  と  $\mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N$  に対しても  $P_C^{\widehat{\mathbf{A}}}(\mathbf{x}) = P_C^{\mathbb{R}}(\widehat{\mathbf{x}})$  が成立する。ここで,  $\widehat{C} := \{\widehat{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^{mN} | \mathbf{x} \in C\}$
8.  $m \leq 4$  のとき<sup>4</sup>, すなわち  $\mathbb{A}_m = \mathbb{R}, \mathbb{C}$  または  $\mathbb{H}$  のとき, すべての  $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{A}_m^{M \times N}$  に対して以下が成立する。

$$\widehat{(\mathbf{A}\mathbf{B})} = \widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{B}} \quad (12)$$

定理 1 を使うことで C-D 線形モデル (5) は以下の等価な実数値線形システムに変換することができる。

$$\widehat{\mathbf{y}} = \widehat{\mathbf{A}}\widehat{\mathbf{x}} + \widehat{\mathbf{b}} \in \mathbb{R}^{mM} \quad (13)$$

図 1 に提案する変換の活用例を示している。C-D 線形システム (5) は同型写像  $\widehat{(\cdot)}$ ,  $\widetilde{(\cdot)}$  を用いることで一旦等価な実線形モデル (13) に変換される。ここで, (13) に最適化・学習の計算プロセスを適用することで実ベクト

<sup>4</sup>関係 (12) は積に結合性がない八元数やそれ以上の次元の C-D 11数では成立しない。

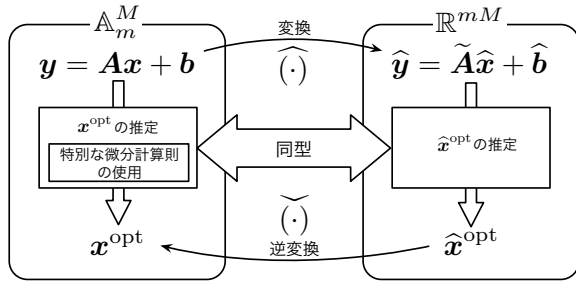


図 1: 提案法の活用例

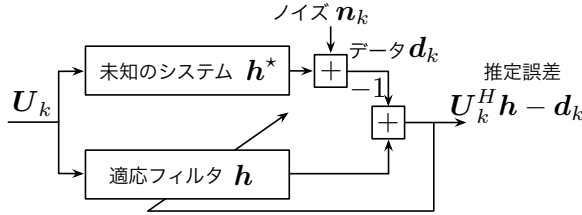


図 2: 適応フィルタ問題のブロック図

ル  $\hat{\mathbf{x}}^{\text{opt}} \in \mathbb{R}^{mM}$  が得られたとする。  $\hat{\mathbf{x}}^{\text{opt}}$  に逆写像  $(\tilde{\cdot})$  を適用することで、対応する C-D 値ベクトル  $\mathbf{x}^{\text{opt}} \in \mathbb{A}_m^M$  が得られる。提案法はこれらの手順を踏むことで特別な微分計算則などの超複素数特有の手続きを踏むことなく所望の推定値  $\mathbf{x}^{\text{opt}}$  を得ることを可能にする。この過程では、MATLAB® quaternion toolbox<sup>20)</sup> などの超複素数計算の特別なライブラリを用いる必要がないことも付記しておく。

## 4 オンライン学習への応用

本節では、提案する変換法を用いたオンライン学習アルゴリズムを紹介する。

### 4.1 オンライン学習問題

以下のような超複素オンライン学習問題 (適応フィルタ問題) を考える。  $\mathbf{u}_k := [u_k, u_{k-1}, \dots, u_{k-N+1}]^T \in \mathbb{A}_m^N$  を時刻  $k$  における入力ベクトルとし、それらの過去  $r$  個分をまとめた  $\mathbf{U}_k := [\mathbf{u}_k, \mathbf{u}_{k-1}, \dots, \mathbf{u}_{k-r+1}] \in \mathbb{A}_m^{N \times r}$  を時刻  $k$  における入力行列とする。また、  $\mathbf{n}_k \in \mathbb{A}_m$  をノイズとし、推定すべき所望のシステムを  $\mathbf{h}^* := [h_1^*, h_2^*, \dots, h_N^*]^T \in \mathbb{A}_m^N$  とする。  $\mathbf{n}_k := [n_k, n_{k-1}, \dots, n_{k-r+1}]^T \in \mathbb{A}_m^r$  を時刻  $k$  におけるノイズベクトルとすると、観測されるデータ  $\mathbf{d}_k := [d_k, d_{k-1}, \dots, d_{k-r+1}]^T \in \mathbb{A}_m^r$  は以下のような時変の C-D 線形システムで表現できる。

$$\mathbf{d}_k := \mathbf{U}_k^H \mathbf{h}^* + \mathbf{n}_k \quad (14)$$

適応フィルタのブロック図を図 2 に示す。定理 1 を適用することで以下のような時変実線形システムで表現される実数値データ  $\hat{\mathbf{d}}_k \in \mathbb{R}^{mr}$  がただちに得られる。

$$\hat{\mathbf{d}}_k := \tilde{\mathbf{U}}_k^T \hat{\mathbf{h}}^* + \hat{\mathbf{n}}_k \quad (15)$$

したがって、超複素適応フィルタ問題は  $(\tilde{\mathbf{U}}_k, \hat{\mathbf{d}}_k) \in \mathbb{R}^{mN \times mr} \times \mathbb{R}^{mr}$ ,  $\forall k < n$  の情報から、未知の実数値システム  $\hat{\mathbf{h}}^* \in \mathbb{R}^{mN}$  を実数の適応フィルタ  $\hat{\mathbf{h}}_n \in \mathbb{R}^{mN}$  で近似する問題に帰着する。この点が従来の研究 (2014年7月1日・2日・神奈川)

### 4.2 $\mathbb{A}_m$ -適応射影劣勾配法 ( $\mathbb{A}_m$ -APSM)

適応射影劣勾配法<sup>10, 11)</sup> (adaptive projected subgradient method, APSM) をベースにした超複素適応学習アルゴリズムを紹介する。APSM は非負凸関数列を漸近的に最小化する効果的なアルゴリズムとして実数値領域で提案された。小文では、図 1 に示した活用法に沿って APSM の適用領域を C-D 数に拡張した  $\mathbb{A}_m$ -APSM を紹介する。

$\Theta_k : \mathbb{A}_m^N \rightarrow [0, \infty)$  ( $k \in \mathbb{N}$ ) を連続な非負凸関数<sup>5)</sup> の列とし、  $\partial\Theta_k(\mathbf{y})$  を  $\Theta_k$  の点  $\mathbf{y} \in \mathbb{A}_m^N$  における劣微分<sup>6)</sup> とする。  $\mathbb{A}_m$ -APSM は凸集合  $C \subset \mathbb{A}_m^N$  上で  $\Theta_k$  の関数列を漸近的に最小化するような C-D 値ベクトル列を生成するアルゴリズムである。

**定義 1** ( $\mathbb{A}_m$ -適応射影劣勾配法 ( $\mathbb{A}_m$ -APSM)). 適当に与えられた  $\mathbf{h}_0 \in \mathbb{A}_m^N$  に対して、  $\mathbb{A}_m$ -APSM は以下のようなベクトル列  $(\mathbf{h}_k)_{k \in \mathbb{N}}$  を生成する。

$$\mathbf{h}_{k+1} = \begin{cases} P_C^{\mathbb{A}_m} \left( \mathbf{h}_k - \lambda_k \frac{\Theta_k(\mathbf{h}_k)}{\|\Theta'_k(\mathbf{h}_k)\|_{\mathbb{A}_m^N}^2} \Theta'_k(\mathbf{h}_k) \right) & (\text{if } \Theta'_k(\mathbf{h}_k) \neq \mathbf{0}), \\ P_C^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h}_k) & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

ここで  $\Theta'_k(\mathbf{h}_k) \in \partial\Theta_k(\mathbf{h}_k)$ ,  $0 \leq \lambda_k \leq 2$  である。

実数領域の場合と同様に、  $\mathbb{A}_m$ -APSM で生成されたベクトル列  $(\mathbf{h}_k)_{k \in \mathbb{N}}$  は単調接近性

$$\|\mathbf{h}_{k+1} - \mathbf{h}^{*(k)}\|_{\mathbb{A}_m^N} \leq \|\mathbf{h}_k - \mathbf{h}^{*(k)}\|_{\mathbb{A}_m^N}, \\ \mathbf{h}^{*(k)} \in \Omega_k := \{\mathbf{h} \in C \mid \Theta_k(\mathbf{h}) = \inf_{\mathbf{x} \in C} \Theta_k(\mathbf{x})\}$$

や有界性、漸近最小性 (詳しくは<sup>9)</sup>) と言った性質を有する。  $\mathbb{A}_m$ -APSM の一例として、以下のようなアルゴリズムが導ける。

**アルゴリズム 1** ( $\mathbb{A}_m$ -適応並列射影法 ( $\mathbb{A}_m$ -adaptive parallel projection,  $\mathbb{A}_m$ -APP)).  $S_i^{(k)} \subset \mathbb{A}_m^N$ ,  $i \in \mathcal{I}_k \subset \mathbb{Z}$  を閉凸集合とする。凸関数列を以下のように定義する。

$$\Theta_k(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{L_k} \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} d_{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h}_k, S_i^{(k)}) d_{\mathbb{A}_m}(\mathbf{x}, S_i^{(k)}) & (\text{if } L_k \neq 0), \\ 0 & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

ここで、  $L_k := \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} d_{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h}_k, S_i^{(k)})$ ,  $\sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} = 1$ ,  $\{\omega_i^{(k)}\}_{i \in \mathcal{I}_k} \subset (0, 1]$  であるとする。このとき、

$$\partial\Theta_k(\mathbf{x}) \ni \Theta'_k(\mathbf{x}) = \begin{cases} \frac{1}{L_k} \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} (\mathbf{x} - P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{x})) & (\text{if } L_k \neq 0), \\ \mathbf{0} & (\text{otherwise}) \end{cases}$$

が成立する。  $\Theta_n$  に対して (4.2) を  $C \subset \mathbb{A}_m^N$  として適用すると以下の更新式が導ける。

$$\mathbf{h}_{k+1} = P_C^{\mathbb{A}_m} \left[ \mathbf{h}_k + \mu_k \left( \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h}_k) - \mathbf{h}_k \right) \right]$$

<sup>5)</sup>  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{A}_m^N$  および  $\forall \nu \in (0, 1)$ ,  $\Theta(\nu\mathbf{x} + (1-\nu)\mathbf{y}) \leq \nu\Theta(\mathbf{x}) + (1-\nu)\Theta(\mathbf{y})$  を満たすとき、関数  $\Theta : \mathbb{A}_m^N \rightarrow \mathbb{R}$  は凸関数と呼ばれる。

<sup>6)</sup>  $\Theta$  の  $\mathbf{y}$  における列微分を  $\Theta$  の  $\mathbf{y}$  における劣勾配全体からなる集合として定義する。すなわち  $\partial\Theta(\mathbf{y}) := \{\mathbf{s} \in \mathbb{A}_m^N \mid \langle \hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}}, \hat{\mathbf{s}} \rangle_{\mathbb{R}} + 11\Theta(\mathbf{y}) \leq \Theta(\mathbf{x}), \forall \mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N\}$  である。 PG0008/14/0000-0001 © 2014 SICE

ここで,  $\mathbf{h}_0 \in C$ ,  $\mu_k \in [0, 2M_k]$  であり,

$$M_k := \begin{cases} \frac{\sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} \left\| P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h}_k) - \mathbf{h}_k \right\|_{\mathbb{A}_m^N}^2}{\left\| \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h}_k) - \mathbf{h}_k \right\|_{\mathbb{A}_m^N}^2} \\ \quad (\text{if } \mathbf{h}_k \notin \bigcap_{i \in \mathcal{I}_k} S_i^{(k)}), \\ 1 \\ \quad (\text{otherwise}) \end{cases}$$

であるとする。アルゴリズム 1 は<sup>10)</sup>で導出されている平均近似適応並列射影法の C-D 領域への自然な拡張になっている。それゆえ NLMS 法<sup>21)</sup>やアフィン射影法<sup>22)</sup>(APA)の C-D 数への拡張,  $\mathbb{A}_m$ -NLMS や  $\mathbb{A}_m$ -APA を特別な場合として含む。さらに  $\mathbb{A}_m = \mathbb{C}$  のとき,  $\mathbb{A}_m$ -APA はこれまで複素数領域で提案されてきた複素アフィン射影法<sup>23)</sup>(C-APA,  $r = 1$  のときは C-NLMS) と一致する。また広義線形複素システムは (14) の形で表現できるため (注意 1 参照), これらの広義線形モデルに対するアルゴリズム, 例えば広義線形複素アフィン射影法<sup>24)</sup>(widely linear complex affine projection, WL-C-APA) も同様に導ける。アルゴリズム 1 はこれらの複素領域で提案されてきたアルゴリズムの C-D 領域への拡張だけでなく, これまで実数領域でのみ提案されていた以下のアルゴリズムの C-D 領域への拡張も特別な場合に含んでいる。

**例 3** ( $\mathbb{A}_m$ -適応並列射影劣勾配法 ( $\mathbb{A}_m$ -adaptive parallel subgradient projection,  $\mathbb{A}_m$ -APSP)).  $\mathcal{I}_k = \{k, k-1, \dots, k-q+1\}$ ,  $C = \mathbb{A}_m^N$ ,

$$S_i^{(k)} = H_i^-(\mathbf{h}_k) \\ := \{\mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^N | (\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{h}}_k)^\top \nabla g_i(\mathbf{h}_k) + g_i(\mathbf{h}_k) \leq 0\}$$

と定める。ここで,  $q$  は並列プロセッサの数で  $g_i(\mathbf{x}) = \|\mathbf{U}_i^H \mathbf{x} - \mathbf{d}_i\|_{\mathbb{A}_m}^2 - \rho$ ,  $\forall \rho \geq 0$  である。このとき, アルゴリズム 1 から  $\mathbb{A}_m$ -適応並列射影劣勾配法 ( $\mathbb{A}_m$ -adaptive parallel subgradient projection,  $\mathbb{A}_m$ -APSP) が導かれる。実数値領域の場合<sup>25)</sup>と同様に,  $\mathbb{A}_m$ -APSP は複数の劣勾配射影の重み付き平均を用いることで  $\mathbb{A}_m$ -NLMS の低い計算コストを保ちつつ雑音環境下での高速で安定した収束性能を達成している。また, アルゴリズム内の関数  $g_k(\mathbf{x})$  とその勾配  $\nabla g_k(\mathbf{x})$ , そして射影  $P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{h})$  の計算は実際には定理 1 を用いて実数で計算されることに注意されたい。

### 4.3 $\mathbb{A}_m$ でのカーネル適応学習問題

再生核の理論を用いた非線形学習法は, 入力データに非線形変換を施して高次元特徴空間に写像し, その特徴空間において線形の手法を適用することで実現される。特徴空間における計算が内積のみを用いて表現されているとき, その内積の計算をカーネル関数の計算に置き換えることにより, 高次元空間での直接の計算を省略することができる。このテクニックをカーネルトリックと呼ぶ。サポートベクトルマシン<sup>26)</sup>の成功を受け, 多くの学習アルゴリズムがカーネルトリックを用いて非線形に拡張されてきた<sup>27)</sup>。近年ではこのパラダイムのオンライン学習への適用が盛んに行われるようになってきている<sup>28)</sup>。C-D 領域においても同様にカーネル

トリックにより C-D 値の非線形システムの学習問題を C-D 値の線形システムの学習問題に帰着することができる。C-D 領域にカーネル非線形適応学習問題を定式化するには本来  $\mathbb{A}_m$  における再生核の議論をする必要があるが, 小文ではその詳細は<sup>9)</sup>に譲ることにする。

$\mathbf{u}_k \in \mathcal{U}_{\mathbb{A}_m}$  を時刻  $k$  での入力ベクトルとする。ここで,  $\mathcal{U}_{\mathbb{A}_m}$  は  $\mathbb{A}_m^N$  のコンパクト部分集合, すなわち有限次元ノルム空間  $(\mathbb{A}_m^N, \|\cdot\|_{\mathbb{A}_m^N})$  の有界閉集合であるとする。カーネルによる学習問題は入力ベクトルの数が増えるほど複雑になっていく。カーネル適応学習問題では観測される入力値が時々刻々と増え, それに伴いモデルが複雑になっていくという問題がある。この問題を回避するため, 時々刻々と得られる入力の一部のみを取り入れるスパース化というテクニックが用いられる。 $\mathcal{J}_k := \{j_1^{(k)}, j_2^{(k)}, \dots, j_{s_k}^{(k)}\} \subset \{1, 2, \dots, k-1\}$  を時刻  $k$  における添え字集合とする。 $\mathcal{U}^m := \{\hat{\mathbf{u}} | \mathbf{u} \in \mathcal{U}_{\mathbb{A}_m}\}$ , カーネル関数を  $K: \mathcal{U}^m \times \mathcal{U}^m \rightarrow \mathbb{R}$  としたとき, 添え字集合に対応するカーネル関数の集合  $\{K(\hat{\cdot}, \hat{\mathbf{u}}_j)\}_{j \in \mathcal{J}_k}$  は辞書と呼ばれる。ここで, 辞書は新たな入力が得られたとき, 必ずしも更新されないことに注意する。所望のデータプロセスを  $d_k = \psi(\mathbf{u}_k)$  とし,  $\psi \in \mathcal{H}_{\mathbb{A}_m}$  を推定すべき関数とすると, カーネル適応学習問題は非線形関数  $\psi$  を

$$\varphi_k(\cdot) = \sum_{j \in \mathcal{J}_k} K(\hat{\cdot}, \hat{\mathbf{u}}_j) \alpha_{j,k} \quad (16)$$

で近似する問題に帰着できる。ここで,  $\mathcal{H}$  を再生核ヒルベルト空間<sup>29)</sup>とし,  $\mathcal{H}_{\mathbb{A}_m} := \{f = f_1 i_1 + \dots + f_m i_m | f_1, \dots, f_m \in \mathcal{H}\}$ ,  $\alpha_{j,k} \in \mathbb{A}_m$  である。するとデータプロセスの推定値  $d'_k := \varphi_k(\mathbf{u}_k)$  は以下のようなベクトル形式で表現できる。

$$d'_k := \varphi_k(\mathbf{u}_k) = \mathbf{K}_k^\top \boldsymbol{\alpha}_k \quad (17)$$

ここで,  $\mathbf{K}_k := [K(\hat{\mathbf{u}}_{j_1^{(k)}}, \hat{\mathbf{u}}_k), K(\hat{\mathbf{u}}_{j_2^{(k)}}, \hat{\mathbf{u}}_k), \dots, K(\hat{\mathbf{u}}_{j_{s_k}^{(k)}}, \hat{\mathbf{u}}_k)]^\top \in \mathbb{R}^{s_k}$ ,  $\boldsymbol{\alpha}_k = [\alpha_{j_1^{(k)}, k}, \alpha_{j_2^{(k)}, k}, \dots, \alpha_{j_{s_k}^{(k)}, k}]^\top \in \mathbb{A}_m^{s_k}$  である。この形式は  $\boldsymbol{\alpha}_k$  に関しては線形であることに注意されたい。簡単のため, カーネル  $K$  は単位ノルムを持つ, すなわち  $K(\hat{\mathbf{u}}, \hat{\mathbf{u}}) = 1$ ,  $\forall \mathbf{u} \in \mathcal{U}$  であるとする。ガウスカーネルはこの条件を満たす。添え字集合  $\mathcal{J}_k$  の更新には文献<sup>28)</sup>で提案されている基準を用いる。具体的には以下の基準が満たされたとき, 添え字  $k$  を  $\mathcal{J}_k$  に追加する。

$$\max_{j \in \mathcal{J}_k} |K(\hat{\mathbf{u}}_k, \hat{\mathbf{u}}_j)| \leq \eta \quad (18)$$

ここで,  $\eta > 0$  は閾値を表す。実数値領域の場合<sup>28)</sup>と同様に, 入力集合のコンパクト性により, 入力データが無限に与えられたとしても辞書が有限であることが保証されている。また  $\mathcal{J}_k = \emptyset$  のとき,  $\varphi_k(\mathbf{u}) := 0$ ,  $\forall \mathbf{u} \in \mathcal{U}$  とし, 条件 (18) は自動的に満たされる。

### 4.4 超複素カーネル適応学習アルゴリズム

最適化するパラメータ (未知のシステム) を  $\boldsymbol{\alpha}_k$  としてアルゴリズム 1 適用すれば, 以下のような超複素非線形適応学習アルゴリズムが得られる。

**アルゴリズム 2** ( $\mathbb{A}_m$ -カーネル適応並列射影法 ( $\mathbb{A}_m$ -kernel adaptive parallel projection,  $\mathbb{A}_m$ -KAPP)).  $S_i^{(k)} \subset \mathbb{A}_m^{s_k}$ ,  $\bar{S}_i^{(k)} \subset \mathbb{A}_m^{s_k+1}$  ( $\forall i \in \mathcal{I}_k \subset \mathbb{Z}$ ) を閉凸集合とし,  $\sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} = 1$ ,  $\{\omega_i^{(k)}\}_{i \in \mathcal{I}_k} \subset (0, 1]$  であるとき,  $\mathbb{A}_m$ -KAPP の更新式は以下で与えられる。

(1) (18) が満たされないとき,  $\mathcal{J}_{k+1} = \mathcal{J}_k$  とし,

$$\alpha_{k+1} = \alpha_k + \mu_k \left( \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\alpha_k) - \alpha_k \right), \quad (19)$$

(2) (18) が満たされるとき,  $\mathcal{J}_{k+1} = \mathcal{J}_k \cup \{k\}$  とし,

$$\alpha_{k+1} = \bar{\alpha}_k + \bar{\mu}_k \left( \sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} P_{\bar{S}_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\bar{\alpha}_k) - \bar{\alpha}_k \right) \quad (20)$$

ここで,  $\bar{\alpha}_k := [\alpha_k^\top, 0]^\top \in \mathbb{A}_m^{s_k+1}$ ,  $\mu_k \in [0, 2\mathcal{M}_k(\alpha_k, S_i^{(k)})]$ ,  $\bar{\mu}_k \in [0, 2\mathcal{M}_k(\bar{\alpha}_k, \bar{S}_i^{(k)})]$  であり,  $\mathbf{x} \in \mathbb{A}_m^s$ ,  $S_i \subset \mathbb{A}_m^s$  に対して

$$\mathcal{M}_k(\mathbf{x}, S_i) := \begin{cases} \frac{\sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} \|P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{x}) - \mathbf{x}\|_{\mathbb{A}_m^s}^2}{\|\sum_{i \in \mathcal{I}_k} \omega_i^{(k)} P_{S_i^{(k)}}^{\mathbb{A}_m}(\mathbf{x}) - \mathbf{x}\|_{\mathbb{A}_m^s}^2} \\ \quad (\text{if } \mathbf{x} \notin \bigcap_{i \in \mathcal{I}_k} S_i), \\ 1 \quad (\text{otherwise}) \end{cases}$$

であるとする。

アルゴリズム 1 と同様に, アルゴリズム 2 は以下のような有用なアルゴリズムを特別な特別な場合に含む。

**例 4** ( $\mathbb{A}_m$ -カーネルアフィン射影法 ( $\mathbb{A}_m$ -kernel affine projection,  $\mathbb{A}_m$ -KAPA)).  $\mathbf{H}_k \in \mathbb{R}^{s_k \times r}$  を  $(p, q)$  要素に  $(\mathbf{H}_k)_{p,q} = K(\hat{\mathbf{u}}_{j_p}^{(k)}, \hat{\mathbf{u}}_{q+1})$  をもつ  $s_k \times r$  行列であるとする。(19) と (20) において,  $\mathcal{I}_k = \{k\}$ ,

$$S_i^{(k)} := \arg \min_{\alpha \in \mathbb{A}_m^{s_k}} \|\mathbf{H}_k^\top \alpha - \mathbf{d}_k\|_{\mathbb{A}_m^r}, \quad (21)$$

$$\bar{S}_i^{(k)} := \arg \min_{\bar{\alpha} \in \mathbb{A}_m^{s_k+1}} \|\bar{\mathbf{H}}_k^\top \bar{\alpha} - \mathbf{d}_k\|_{\mathbb{A}_m^r} \quad (22)$$

ただし,  $\mathbf{d}_k = [d_k, d_{k-1}, \dots, d_{k-r+1}]^\top \in \mathbb{A}_m^r$ ,  $\bar{\mathbf{H}}_k := [\mathbf{H}_k^\top, \bar{\mathbf{h}}_k^\top]^\top \in \mathbb{R}^{(s_k+1) \times r}$ ,  $\bar{\mathbf{h}}_k := [K(\hat{\mathbf{u}}_k, \hat{\mathbf{u}}_k), K(\hat{\mathbf{u}}_k, \hat{\mathbf{u}}_{k-1}), \dots, K(\hat{\mathbf{u}}_k, \hat{\mathbf{u}}_{k-r+1})]$  と定めると,  $\mathbb{A}_m$ -カーネルアフィン射影法 ( $\mathbb{A}_m$ -KAPA) が導出される。このアルゴリズムはカーネルアフィン射影法<sup>28)</sup> (KAPA) の C-D 領域への自然な拡張になっている。実数値領域の場合と同様に, 特に,  $r = 1$  のとき  $\mathbb{A}_m$ -KAPA から C-D 域に拡張された KNLMS 法, すなわち  $\mathbb{A}_m$ -KNLMS 法が導かれる。

## 5 数値例

本章では 4 章で紹介した適応学習アルゴリズムの有効性を, C-D 値の線形適応システム同定問題と非線形チャネル等化問題の数値例によって確認する。これらの適応アルゴリズムは一般の C-D 数で統一的に設計されているため, C-D 数の次元数の変更でアルゴリズムを再設計する必要がない。小文では紙面の都合上, 各例において一部の適用領域についてのみ紹介するが, 他の領域での数値実験結果については<sup>9)</sup>を参照されたい。  
第5回学会報告書「非線形システム同定問題」(2014年7月1日・2日・神奈川)

## 5.1 線形システム同定問題

以下の  $\mathbf{h}^* \in \mathbb{A}_m^N$  を係数にもつ C-D 値システム  $\mathbf{h}^* \in \mathbb{A}_m^N$  ( $N := 200$ ) を考える。

$$\mathbf{h}_k^* := \alpha_m \sum_{\ell=1}^m (-1)^{\ell-1} \left[ 1 + \cos \left( \frac{2\pi(k-100)}{200\ell} \right) \right] \mathbf{i}_\ell \quad (23)$$

ここで  $k = 1, \dots, 200$ ,  $\alpha_m \in \mathbb{R}$  は単位ノルムになるように  $(\alpha_m, \alpha_8) = (0.0422, 0.0274)$  と固定する。この設定は複素数での適応学習問題で頻りに用いられる数値例<sup>17)</sup> の C-D 領域への自然な拡張になっている。入力信号  $u_k \in \mathbb{A}_m$  はそれぞれの領域で以下のように生成されるものとする。

$$u_k := z_{1,k}i_1 + z_{2,k}i_2 + z_{3,k}i_3 + z_{4,k}i_4 \in \mathbb{H},$$

$$u_k := \sum_{\ell=1}^8 z_{\ell,k}i_\ell \in \mathbb{O},$$

ここで  $z_{\ell,k} \in \mathbb{R}$  ( $\ell = 1, \dots, 8$ ) は独立で同一の平均 0 分散 1 の実数値ガウス分布に従う。ノイズ  $n_k \in \mathbb{A}_m$  は平均 0 の C-D 値白色ガウス雑音であるとする。すなわち,  $n := \sum_{\ell=1}^m n_{\ell,k}i_\ell$  であり  $n_{\ell,k} \in \mathbb{R}$  ( $\ell = 1, \dots, m$ ) がそれぞれ白色ガウス雑音である。信号雑音比は  $\text{SNR} = 30$  dB であるとする。ここで,  $\text{SNR} := 10 \log_{10}(\mathbb{E}[\mathbf{u}_k^H \mathbf{h}^*]^2 / \mathbb{E}[n_k]^2)$ ,  $\mathbb{E}(\cdot)$  は期待値を表す。

四元数においてはアルゴリズム 1 から導出される  $\mathbb{A}_m$ -APSP の四元数の場合, すなわち  $\mathbb{H}$ -APSP と既存の四元数 LMS 法<sup>30)</sup> ( $\mathbb{H}$ -LMS) および四元数アフィン射影法<sup>8)</sup> ( $\mathbb{H}$ -APA) を比較する。八元数においては知る限りにおいて既存の適応学習アルゴリズムが提案されていないので, 八元数の要素の半分ずつを独立に  $\mathbb{H}$ -LMS で推定する手法 (element wise  $\mathbb{H}$ -LMS) を既存手法としている。提案変換法を用いることで簡単に実装可能な八元数適応学習アルゴリズム  $\mathbb{O}$ -LMS を  $\mathbb{O}$ -APA 既存手法と比較する。本数値例で用いられているパラメータの具体的な値を表 1 で示す。各領域においてステップサイズ  $(\lambda, \mu_k)$  は初期収束速度が同一になるように固定している。

表 1: 5.1 でのパラメータ設定

	$r = 1$	$r = 2$
$\mathbb{H}$ -LMS	$\lambda = 0.001$	N/A
$\mathbb{H}$ -APA	$\mu_k = 1.0$	$\mu_k = 1.0$
$\mathbb{H}$ -APSP	$\mu_k = 2.0,$ $q = 10.0$	$\mu_k = 2.0,$ $q = 10.0$
element-wise $\mathbb{H}$ -LMS	$\lambda = 0.001$	N/A
$\mathbb{O}$ -LMS	$\lambda = 0.001$	N/A
$\mathbb{O}$ -APA	$\mu_k = 0.5$	$\mu_k = 0.25$

図 3 と図 4 はそれぞれ四元数と八元数の適応アルゴリズムをシステム不一致度 (system-mismatch) で比較したときの性能比較図である。 $k$  回繰り返したときの C-D 値のシステム不一致度  $\text{sysmiss}_{\mathbb{A}_m}(k)$  は以下で与えられ, 300 回試行の平均をとる。

$$\text{sysmiss}_{\mathbb{A}_m}(k) := 10 \log_{10} \frac{\|\mathbf{h}^* - \mathbf{h}_k\|_{\mathbb{A}_m^N}^2}{\|\mathbf{h}^*\|_{\mathbb{A}_m^N}^2} \quad (24)$$

この指標はシステム同定問題で頻りに用いられる (実数値) システム不一致度の C-D 領域への自然な拡張である。  
114 14000677/470006006 © 2014 SICE

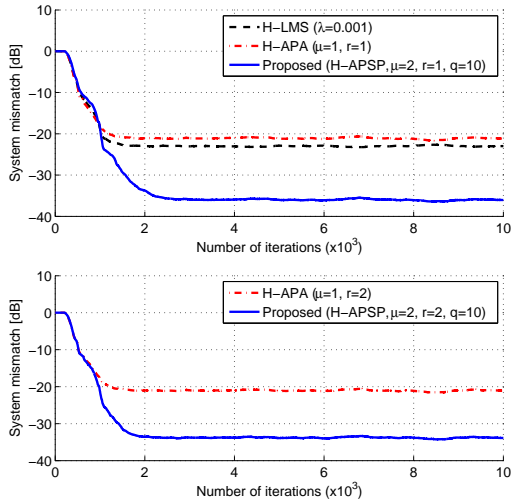


図 3: 四元数の場合の提案手法と既存手法の  $r = 1$  (上図) と  $r = 2$  (下図) における比較

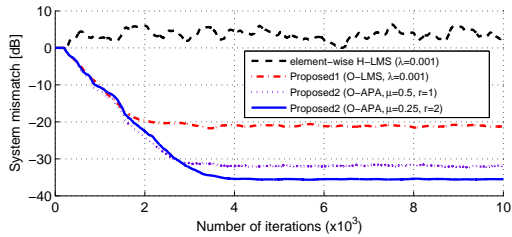


図 4: 八元数の場合の提案手法と既存手法の  $r = 1$  (点線) と  $r = 2$  (実線) における比較

る。四元数領域では提案法 H-APSP が並列射影の恩恵により最もよい定常性能を達成している (図3)。八元数の場合、提案変換法によって新たに実現された O-LMS や O-APA が定常状態に収束しているのに対し、要素ごとの H-LMS は実際の八元数システムを表現できていないため収束していない。また、O-APA ( $r = 2$ ) では過去の入力値を有効活用することで  $r = 1$  の場合より良い定常性能を達成している。

## 5.2 非線形チャンネル等化問題

以下の複素数値のチャンネル等化問題を考える。入力信号  $s_k$  が以下で与えられるとする。

$$s_k := 0.70(\sqrt{1 - \beta}z_{1,k}i_1 + \beta z_{2,k}i_2) \in \mathbb{C}$$

ここで、 $z_{\ell,k}$  ( $\ell = 1, 2$ ) は独立に同一の平均 0 分散 1 の実数値ガウス分布に従うとする。受信機で観測される信号は以下で与えられるとする。

$$y_k := x_k + (0.2i_1 + 0.25i_2)x_k^2 + (0.12i_1 + 0.09i_2)x_k^3 + n_k \in \mathbb{C},$$

$$x_k := (-0.9i_1 + 0.8i_2)s_k + (0.6i_1 - 0.7i_2)s_{k-1} \in \mathbb{C}$$

つまり、チャンネルは時不変の線形システムと非記憶の非線形性を連結することで非線形システムとしてモデル化される。また  $n_k \in \mathbb{A}_m$  ( $= \mathbb{C}$  or  $\mathbb{H}$ ) は C-D 値白色ガウス雑音であり、 $w_k := y_k - n_k \in \mathbb{C}$  とすると信号対雑音比は  $\text{SNR} = \frac{\mathbb{E}[|x_k|^2]}{\mathbb{E}[|n_k|^2]} = 18$  (2014年7月1日・2日・神奈川)

dB であるとする。チャンネル等化問題の目的は逆フィルタを構成することにある。つまり、受信した信号  $(y_n)_{n < k}$  から入力を  $s_k$  を復元することを目的とする。図5にチャンネル等化問題のブロック図を示す。入力ベクトルを  $\mathbf{u}_k := [y_{n+D}, y_{n+D-1}, \dots, y_{n+D-N+1}]^T \in \mathbb{C}^N$  ( $N = 5$ ) として、所望の出力を  $d_k := s_k$  とする。ここで、 $D = 2$  は等化の時間差を表す。紙面の都合上、小文では既存手法が比較的多い複素数の場合のみを数値例として紹介する。四元数の場合の数値例は<sup>9)</sup>を参照されたい。

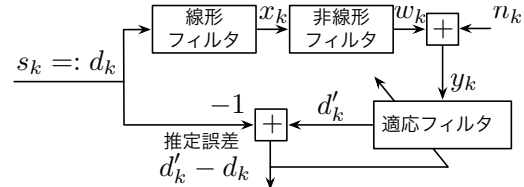


図 5: 非線形チャンネル等化問題

本数値例では既存の非線形適応学習アルゴリズムである複素多層パーセプトロン<sup>17)</sup>(complex multilayer perceptron, C-MLP)、複素非線形最急降下法<sup>1)</sup>(complex nonlinear gradient descent, C-NGD) と複素数の場合の提案手法  $\mathbb{A}_m$ -KAPA, すなわち C-KAPA ( $r = 1$  の場合なので C-KNLMS と等価) を単純な数値例として比較する。C-MLP と C-NGD に対しては活性化関数として複素双曲線正接関数 (fully complex hyperbolic tangent)  $\tanh(\cdot)$  を使い、C-KAPA についてはカーネル関数として実数値ガウスカーネル  $K(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \exp(-\|\hat{\mathbf{x}} - \hat{\mathbf{y}}\|_{\mathbb{R}}^2/5^2)$ ,  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}^N$  を用いる。

また、本数値例で用いているパラメータの具体的な値を表2に示す。ステップサイズ ( $\lambda, \mu_k$ ) は定常性能が最も良くなるように選ぶ。図6に既存の非線形適応学習

表 2: 5.2 でのパラメータ設定

C-MLP	$\lambda = 0.01$ (# of hidden layers) = 40
C-NGD	$\lambda = 0.01$
C-KAPA	$\mu_k = 0.5, r = 1.0, \eta = 0.7$

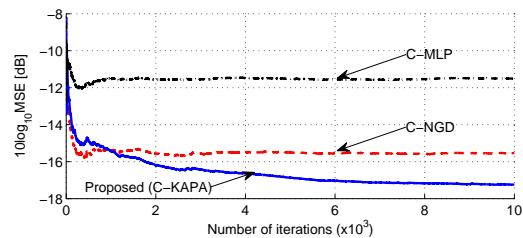


図 6: 既存の非線形適応学習アルゴリズムと提案アルゴリズムの性能比較

アルゴリズムと提案アルゴリズムとの比較を示す。提案アルゴリズム C-KAPA は既存の C-MLP や C-NGD よりも良い定常性能を達成している。これは  $\mathbb{A}_m$ -APSM のもつ単調接近性などの恩恵であると考えられる。114

## 6 結論

小文では超複素数 (C-D) 線形システムの実変換を紹介し、この変換によって C-D 線形モデルと等価な実線形モデルが直ちに得られることを示した。この実変換は2つの同型変換を組み合わせたことによって実現されている。

提案した変換の超複素オンライン学習への応用例として、適応射影劣勾配法 (APSM) をベースとした超複素適応学習アルゴリズム  $\mathbb{A}_m$ -APSM を紹介した。 $\mathbb{A}_m$ -APSM は多くの超複素適応学習アルゴリズムを特別な場合として含んでいる。また、カーネルトリックを適用することで  $\mathbb{A}_m$ -APSM は非線形の適応学習アルゴリズムに拡張することができる。数値実験では、紹介した超複素適応学習アルゴリズムの性能が既存法の性能を大きく上回ることを示した。

提案した変換法は既存のアルゴリズムだけでなく、実数の世界で今後提案されるより発展的なアルゴリズムを C-D 領域版に拡張することにも利用できることを付記しておく。

## 謝辞

本研究会への発表機会を与えてくださった産業技術総合研究所の新田徹氏に深く感謝申し上げます。

## 参考文献

- 1) D. P. Mandic and S. L. Goh. *Complex Valued Nonlinear Adaptive Filters: Noncircularity, Widely Linear and Neural Models*. John Wiley and Sons Ltd, 2009.
- 2) J. Benesty, J. Chen, and Y. Huang. A widely linear distortionless filter for single-channel noise reduction. *IEEE Signal Process. Lett.*, 17(5):469–472, May. 2010.
- 3) S. B. Choe and J. J. Faraway. Modeling head and hand orientation during motion using quaternions. *SAE Trans. J. Aeros.*, 113(1):186–192, 2004.
- 4) J. C. K. Chou. Quaternion kinematic and dynamic differential equations. *IEEE Trans. Robot. Autom.*, 8(1):53–64, Feb. 1992.
- 5) W. Wirtinger. Zur formalen theorie der funktionen von mehr komplexen veränderlichen. *Mathematische Annalen*, 97:357–375, 1927.
- 6) K. Kreutz-Delgado. The complex gradient operator and the  $\mathbb{C}\mathbb{R}$ -calculus, 2009. [Online]. Available: <http://dsp.ucsd.edu/~kreutz/PEI05.html>, Course ECE275A Lecture Supplement on Complex Vector Calculus.
- 7) D. P. Mandic, C. Jahanchahi, and C. C. Took. A quaternion gradient operator and its applications. *IEEE Signal Process. Lett.*, 18(1):47–50, Jan. 2011.
- 8) C. Jahanchahi, C. C. Took, and D. P. Mandic. A class of quaternion valued affine projection algorithms. *Signal Processing*, 93:1712–1723, 2013.
- 9) T. Mizoguchi and I. Yamada. An algebraic translation of Cayley-Dickson linear systems and its applications to online learning. *IEEE Trans. Signal Process.*, 62(6):1438–1453, Mar. 2014.
- 10) 山田 功. 射影型適応アルゴリズムの新展開—適応射影劣勾配法による統一的視点とその応用. 信学論, 86(8):654–658, Aug. 2003.
- 11) I. Yamada and N. Ogura. Adaptive projected subgradient method for asymptotic minimization of sequence of nonnegative convex functions. *Numer. Funct. Anal. Optim.*, 25(7-8):593–617, 2004.
- 12) I. Kantor and A. Solodovnikov. *Hypercomplex numbers, An Elementary Introduction to Algebras*. Springer, 1989.
- 13) John C. Baez. The octonions. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 39(2):145–205, 2001.
- 14) W. K. Clifford. Applications of Grassmann's extensive algebra. *Amer. J. Math.*, 1(4):350–358, 1878.
- 15) R. D. Schafer. *An Introduction to Nonassociative Algebras*. Academic Press, 1966.
- 16) B. Picinbono and P. Chevalier. Widely linear estimation with complex data. *IEEE Trans. Signal Process.*, 43(8):2030–2033, Aug. 1995.
- 17) T. Adali and S. Haykin, editors. *Adaptive Signal Processing: Next Generation Solutions*. Wiley, 2009.
- 18) T. Adali, P. J. Schreier, and L. L. Scharf. Complex-valued signal processing: The proper way to deal with impropriety. *IEEE Trans. Signal Process.*, 59(11):5101–5125, 2011.
- 19) C. C. Took and D. P. Mandic. A quaternion widely linear adaptive filter. *IEEE Trans. Signal Process.*, 58(8):4427–4431, 2010.
- 20) S. Sangwine and N. Le Bihan. Quaternion toolbox for MATLAB®, 2005. [Online]. Available: <http://qtfm.sourceforge.net/> (online software library).
- 21) J. Nagumo and J. Noda. A learning method for system identification. *IEEE Trans. Autom. Control*, 12(3):282–287, Mar. 1967.
- 22) 尾関和彦, 梅田哲夫. アフィン部分空間への直交射影を用いた適応フィルタ・アルゴリズムとその性質. 信学誌 (A), 67-A(2):126–132, Feb. 1984.
- 23) P. S. R. Diniz. *Adaptive Filtering: Algorithms and Practical Implementation*. Springer, Berlin, 3rd edition, 2008.
- 24) Y. Xia, C. C. Took, and D. P. Mandic. An augmented affine projection algorithm for the filtering of noncircular complex signals. *Signal Processing*, 90:1788–1799, 2010.
- 25) I. Yamada, K. Slavakis, and K. Yamada. An efficient robust adaptive filtering algorithm based on parallel subgradient projection techniques. *IEEE Trans. Signal Process.*, 50(5):1091–1101, May. 2002.
- 26) V. N. Vapnik. *The Nature of Statistical Learning Theory*. Springer, New York, 1995.
- 27) B. Schölkopf, A. J. Smola, and K.-R. Müller. Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem. *Neural Computation*, 10(5):1299–1319, Jul. 1998.
- 28) C. Richard, J. C. M. Bermudez, and P. Honeine. Online prediction of time series data with kernels. *IEEE Trans. Signal Process.*, 57(3):1058–1067, Mar. 2009.
- 29) N. Aronszajn. Theory of reproducing kernels. *Trans. Amer. Math. Soc.*, 68(3):337–404, May. 1950.
- 30) C. Jahanchahi, C. C. Took, and D. P. Mandic. On gradient calculation in quaternion adaptive filtering. In *Proc. IEEE ICASSP*, 2012.

# 3層複素ニューラルネットワークの特異点近傍における学習ダイナミクス

○新田 徹 (産業技術総合研究所)

## Learning Dynamics of Three-Layered Complex-Valued Neural Networks in the Neighborhood of the Singular Points

\*Tohru Nitta (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST)

**Abstract** - In this paper, the effects of the singular points on learning dynamics in the complex-valued neural network are elucidated. It is learned that the complex-valued neural network cannot be easily influenced by the singular points, whereas the learning of the usual real-valued neural network can be attracted in the neighborhood of singular points, which causes a standstill in learning. Simulation results on the learning dynamics of the three-layered real-valued and complex-valued neural networks in the neighborhood of singularities support the analytical results.

**Key Words:** Neural network, Complex number, Singular point, Learning speed

### 1 はじめに

複素ニューラルネットワーク (複素 NN) は信号処理や画像処理のような複素数や2次元データを扱う様々な分野に応用されつつある<sup>6, 12)</sup>。階層型ニューラルネットワークの応用では, BP学習アルゴリズムがよく使われている。それに対応する複素BP学習アルゴリズムは, 1990年代の初めに何人かの研究者によって独立に提案された<sup>2, 5, 7, 8, 9, 10)</sup>。複素BPは複素パターンを自然に学習することができる他, 複素NN固有の特性が備わっていることが分かっている<sup>11)</sup>。

一方, 近年, 階層構造に基づいた学習モデルの特異点に関する研究が行われ, 特異点が学習ダイナミクスに悪い影響を与えることが分かってきている<sup>1, 3, 17)</sup>。ただし, 複素NNは, 実NNに存在するある種のローカルミニマムを持たないことが指摘されている<sup>13)</sup>。他方では, 特異点を積極的に利用したニューラルネットワークの学習手法も考案されてきている<sup>15, 16)</sup>。

本稿では, 特異点が階層型複素NNの学習ダイナミクスに与える影響について調べたので報告する<sup>1)</sup>。実BPの場合, 学習パラメータが特異点の近傍に引き付けられ, それが学習停滞の原因になっている。それに対して, 複素BPの学習則には線型結合構造が存在し, それが特異点から離れる速さを高め, 特異点の影響の度合いが実BPに比べて低くなっている可能性がある。コンピュータシミュレーションの結果, 複素NNが特異点から離れる速さは, 実NNに

比べて速いことが示唆された。複素BPの学習速度は実BPに比べて, 平均で2~3倍速いということが報告されているが, 上記のことが起因している可能性がある<sup>4, 10)</sup>。

### 2 複素ニューラルネットワーク

本章では, 解析の対象とする複素NNについて述べる。

まず, 次のような複素ニューロン $n$ を考える。入力信号, 重み, 閾値, 出力信号はすべて複素数であり, 入力の総和は $U_n = \sum_m W_{nm} X_m + V_n$ で与えられる。ここで,  $W_{nm}$ は複素ニューロン $n$ と $m$ の間の(複素数値)重みであり,  $X_m$ は複素ニューロン $m$ からの(複素数値)入力信号,  $V_n$ は複素ニューロン $n$ の(複素数値)閾値である。(複素数値)出力信号を得るために, 入力の総和 $U_n$ を実部と虚部に分ける: $U_n = x + iy = z$ 。ここで,  $i$ は $\sqrt{-1}$ を表す。(複素数値)出力信号は

$$\varphi_C(z) = \varphi(x) + i\varphi(y), \quad (1)$$

で与えられる。ここで,  $\varphi(u) \stackrel{\text{def}}{=} \tanh(u) = (\exp(u) - \exp(-u)) / (\exp(u) + \exp(-u))$ ,  $u \in \mathbf{R}$  ( $\mathbf{R}$ は実数全体の集合)である。

複素NNは上記のような複素ニューロンから構成される。解析対象の複素NNは3層 $L-H-1$ ネットワークとする。ただし, 出力ニューロンの活性化関数 $\psi_C$ は線型関数とする, つまり, 任意の $z \in \mathbf{C}$ に対して,  $\psi_C(z) = z$ である ( $\mathbf{C}$ は複素数全体の集合)。入力パターン $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_L)^T \in \mathbf{C}^L$ に対して, 出力ニュー

<sup>1)</sup>本稿は文献<sup>14)</sup>を簡潔に和訳したものである。

ロンの出力値は

$$f^{(H)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}^{(H)}) = \sum_{j=1}^H \nu_j \varphi_C(\tilde{\mathbf{w}}_j^T \tilde{\mathbf{x}}) + \nu_0 \in \mathbf{C}, \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 $x_k \in \mathbf{C}$  は入力ニューロン  $k$  への入力信号 ( $1 \leq k \leq L$ )、 $T$  は転置を表す。また、 $\tilde{\mathbf{w}}_j = (w_{j0} \ \mathbf{w}_j^T)^T \in \mathbf{C}^{L+1}$  であり、 $w_{j0} \in \mathbf{C}$  は中間ニューロン  $j$  の閾値、 $\mathbf{w}_j = (w_{j1}, \dots, w_{jL})^T \in \mathbf{C}^L$  は、中間ニューロン  $j$  の重みベクトル ( $w_{jk} \in \mathbf{C}$  は、入力ニューロン  $k$  と中間ニューロン  $j$  の間の重み) ( $1 \leq j \leq H$ )。また、 $\tilde{\mathbf{x}} = (1 \ \mathbf{x}^T)^T \in \mathbf{C}^{L+1}$  であり、 $\nu_j \in \mathbf{C}$  は中間ニューロン  $j$  と出力ニューロンとの間の重みであり ( $1 \leq j \leq H$ )、 $\nu_0 \in \mathbf{C}$  は出力ニューロンの閾値である。 $\boldsymbol{\theta}^{(H)} = (\nu_0, \nu_1, \dots, \nu_H, \tilde{\mathbf{w}}_1^T, \dots, \tilde{\mathbf{w}}_H^T)^T$  は、すべてのパラメータを一つのベクトルにまとめたものである。

$N$  個の複素数値学習データ  $\{(\mathbf{x}^{(p)}, y^{(p)}) \in \mathbf{C}^L \times \mathbf{C} \mid p = 1, \dots, N\}$  が与えられたとき、それらによって表現される関係を実現するのに複素 NN を使う。学習の目的は、

$$E_H(\boldsymbol{\theta}^{(H)}) = \sum_{p=1}^N l(y^{(p)}, f^{(H)}(\mathbf{x}^{(p)}; \boldsymbol{\theta}^{(H)})) \in \mathbf{R}, \quad (3)$$

によって定義される誤差関数を最小化するパラメータを見つけることである。ここで、 $l(y, z) : \mathbf{C} \times \mathbf{C} \rightarrow \mathbf{R}$  は、 $l(y, z) \geq 0$  を満たし、等号が成り立つのは  $y = z$  のときに限るような損失関数である。損失関数  $l$  は実数値関数なので、複素関数として正則ではないことに注意されたい。筆者の知る限り、これまでに提案された階層型複素 NN の大半は、実数値を取る平均自乗誤差  $l(y, z) = (1/2)|y - z|^2$  を使っている (2, 5, 7, 8, 9, 10)。

### 3 学習ダイナミクス

本章では、3層複素 NN の特異点近傍における振る舞いを数理的に調べ、3層実 NN と比較する。

第2章において述べた複素 NN を考えるが、簡単のために、1-1-1 ネットワークとする。任意の入力信号  $x_1 \in \mathbf{C}$  に対して、複素 NN は、

$$f^{(1)}(x_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)}) = \nu_1 \varphi_C(\tilde{\mathbf{w}}_1^T \tilde{\mathbf{x}}) + \nu_0 \in \mathbf{C} \quad (4)$$

を出力する。ここで、 $\tilde{\mathbf{w}}_1 = (w_{10} \ w_{11})^T \in \mathbf{C}^2$  であり、 $w_{10} \in \mathbf{C}$  は中間ニューロンの閾値、

$w_{11} \in \mathbf{C}$  は入力ニューロンと中間ニューロンの間の重みである。また、 $\tilde{\mathbf{x}} = (1 \ x_1)^T \in \mathbf{C}^2$  であり、 $\nu_1 \in \mathbf{C}$  は中間ニューロンと出力ニューロンとの間の重み、 $\nu_0 \in \mathbf{C}$  は出力ニューロンの閾値であり、 $\boldsymbol{\theta}^{(1)} = (\nu_0, \nu_1, \tilde{\mathbf{w}}_1^T)^T$  である。このネットワークの学習パラメータ (重みと閾値) は8個である。ここで、1つの複素パラメータは実部と虚部から構成されることから、2個と数えている。損失関数は、

$$l(y, x_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)}) = \frac{1}{2} |y - f^{(1)}(x_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})|^2, \quad (5)$$

と定義される。ここで、 $y \in \mathbf{C}$  は出力ニューロンに対する教師信号である。

標準的な最急降下法の場合、平均学習ダイナミクスは次のようになる：

$$\dot{\nu}_1(t) = -\varepsilon \left[ \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial \nu_1^R} + i \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial \nu_1^I} \right], \quad (6)$$

$$\dot{w}_{11}(t) = -\varepsilon \left[ \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial w_{11}^R} + i \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial w_{11}^I} \right], \quad (7)$$

$$\dot{\nu}_0(t) = -\varepsilon \left[ \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial \nu_0^R} + i \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial \nu_0^I} \right], \quad (8)$$

$$\dot{w}_{10}(t) = -\varepsilon \left[ \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial w_{10}^R} + i \frac{\partial l(y, \hat{x}_1; \boldsymbol{\theta}^{(1)})}{\partial w_{10}^I} \right]. \quad (9)$$

ここで、 $\hat{x}_1 \stackrel{\text{def}}{=} E[x_1]$  であり、学習パラメータ  $z$  に対して、 $z^R \stackrel{\text{def}}{=} \text{Re}[z]$ 、 $z^I \stackrel{\text{def}}{=} \text{Im}[z]$  である。

そこで、中間ニューロンと出力ニューロンの間の重み  $\nu_1$  の特異点  $\nu_1 = 0$  の近傍における振る舞いを調べる。 $\nu_1 = 0$  とおくと、式 (6) から、

$$\dot{\nu}_1(t) = \varepsilon(y - \nu_0) \cdot \overline{\varphi_C(\tilde{\mathbf{w}}_1^T \tilde{\mathbf{x}})} \quad (10)$$

となる。ここで、 $\hat{\tilde{\mathbf{x}}} = (1 \ \hat{x}_1)^T$  である。

次に、2-1-2 実 NN を考える。任意の入力信号  $\mathbf{x} = (x_1, x_2)^T \in \mathbf{R}^2$  に対して、2-1-2 実 NN は、

$$g(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = (\nu_1 \varphi(\tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{x}}) + \nu_{10}, \nu_2 \varphi(\tilde{\mathbf{w}}^T \tilde{\mathbf{x}}) + \nu_{20})^T \quad (11)$$

を出力する。ここで、 $\tilde{\mathbf{w}} = (w_{10} \ \mathbf{w}^T)^T \in \mathbf{R}^3$  であり、 $w_{10} \in \mathbf{R}$  は中間ニューロンの閾値、 $\mathbf{w} = (w_{11}, w_{12})^T \in \mathbf{R}^2$  は入力ニューロンと中間ニ



ニューロンの間の重みベクトル,  $(w_{1j} \in \mathbf{R}$  は入力ニューロン  $j$  と中間ニューロンとの間の重みである ( $j = 1, 2$ )). また,  $\hat{\mathbf{x}} = (1 \ \mathbf{x}^T)^T \in \mathbf{R}^3$  であり,  $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2)^T \in \mathbf{R}^2$  は中間ニューロンと出力ニューロンとの間の重みベクトルである ( $\nu_l \in \mathbf{R}$  は中間ニューロンと出力ニューロン  $l$  との間の重み ( $l = 1, 2$ )).  $\boldsymbol{\nu}_0 = (\nu_{10}, \nu_{20})^T \in \mathbf{R}^2$  は出力ニューロンの閾値ベクトルである ( $\nu_{l0} \in \mathbf{R}$  は出力ニューロン  $l$  の閾値である ( $l = 1, 2$ )). また,  $\varphi(u) \stackrel{\text{def}}{=} \tanh(u), u \in \mathbf{R}, \boldsymbol{\theta} = (\boldsymbol{\nu}_0^T, \boldsymbol{\nu}^T, \tilde{\mathbf{w}}^T)^T$  である.

このネットワークの学習パラメータ (重みと閾値) は7個であり, 先に述べた複素 NN の学習パラメータ数とほぼ同じであるので, 比較の対象としては公平であると考えられる. 損失関数は,

$$l(\mathbf{y}, \mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{y} - g(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})\|^2, \quad (12)$$

と定義する. ここで,  $\mathbf{y} = (y_1, y_2)^T \in \mathbf{R}^2$  は出力ニューロンに対する教師信号である.

標準的な最急降下法の場合, 平均学習ダイナミックスは次のようになる:

$$\dot{\nu}_1(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial \nu_1}, \quad (13)$$

$$\dot{\nu}_2(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial \nu_2}, \quad (14)$$

$$\dot{w}_{11}(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial w_{11}}, \quad (15)$$

$$\dot{w}_{12}(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial w_{12}}, \quad (16)$$

$$\dot{w}_{10}(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial w_{10}}, \quad (17)$$

$$\dot{\nu}_{10}(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial \nu_{10}}, \quad (18)$$

$$\dot{\nu}_{20}(t) = -\varepsilon \frac{\partial l(\mathbf{y}, \hat{\mathbf{x}}; \boldsymbol{\theta})}{\partial \nu_{20}}. \quad (19)$$

ここで,  $\hat{\mathbf{x}} \stackrel{\text{def}}{=} E[\mathbf{x}]$  である.  $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{0}$  とすると, 式 (13) と式 (14) から, 次の式を得る.

$$\dot{\nu}_1(t) = \varepsilon (y_1 - \nu_{10}) \cdot \varphi(\tilde{\mathbf{w}}^T \hat{\mathbf{x}}), \quad (20)$$

$$\dot{\nu}_2(t) = \varepsilon (y_2 - \nu_{20}) \cdot \varphi(\tilde{\mathbf{w}}^T \hat{\mathbf{x}}). \quad (21)$$

ここで,  $\hat{\mathbf{x}} = (1 \ \hat{\mathbf{x}}^T)^T$  である. これは, 中間ニューロンと出力ニューロンとの間の重み  $\boldsymbol{\nu} = (\nu_1, \nu_2)^T$  の特異点  $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{0}$  の近傍における平均的ダイナミックスを表している.

そこで, 複素 NN の特異点近傍における平均ダイナミックスを実 NN のものと比較する. 式 (10) は次のように書き換えることができる:

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_1^R(t) = & \varepsilon \left[ (y^R - \nu_0^R) \cdot \varphi(w_{11}^R x_1^R - w_{11}^I x_1^I + w_{10}^R) \right. \\ & \left. + (y^I - \nu_0^I) \cdot \varphi(w_{11}^R x_1^I + w_{11}^I x_1^R + w_{10}^I) \right], \end{aligned} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \dot{\nu}_1^I(t) = & \varepsilon \left[ -(y^R - \nu_0^R) \cdot \varphi(w_{11}^R x_1^I + w_{11}^I x_1^R + w_{10}^I) \right. \\ & \left. + (y^I - \nu_0^I) \cdot \varphi(w_{11}^R x_1^R - w_{11}^I x_1^I + w_{10}^R) \right]. \end{aligned} \quad (23)$$

式 (22) と式 (23) から分かるように,  $\dot{\nu}_1^R(t)$  と  $\dot{\nu}_1^I(t)$  はそれぞれ  $\varphi$  の2つの線型結合から構成されている. これらの式は単純化すると次のように書ける:

$$\Delta(\text{複素 NN のパラメータ}) = a\phi(u_1) + b\phi(u_2), \quad (24)$$

$$\Delta(\text{実 NN のパラメータ}) = c\phi(u_3). \quad (25)$$

たとえば,  $a = b = c$  かつ  $u_1 = u_2 = u_3$  ならば,  $\Delta(\text{複素 NN のパラメータ}) = 2a\phi(u_1) = 2 \times \Delta(\text{実 NN のパラメータ})$  が成り立つ. また, たとえ  $b\phi(u_2)$  がゼロに近い値であっても, 必ずしも  $a\phi(u_1)$  がゼロに近い値とは限らないため,  $\Delta(\text{複素 NN のパラメータ})$  が容易にゼロに近い値になるとは限らない. このような構造により,  $\dot{\nu}_1^R(t)$  と  $\dot{\nu}_1^I(t)$  (式 (22), 式 (23)) が,  $\dot{\nu}_1(t)$  と  $\dot{\nu}_2(t)$  (式 (20), 式 (21)) に比べて, 大きな値を取る可能性が高い. このように, 複素 NN が特異点から離れる速さは実 NN に比べて速いと考えられる.

#### 4 シミュレーション

本章では, 標準的な最急降下法を使った3層複素 NN の特異点近傍における学習ダイナミックスと, 標準的な最急降下法を使った3層実 NN の学習ダイナミックスとをシミュレーションを通して比較する.

実験では, 表1に示す3種類の(複素)学習パターンを使い, 学習率  $\varepsilon$  は0.5とした. ネットワークは, 3章において述べた3層1-1-1複素 NN (特異点は,  $\tilde{\mathbf{w}}_1 = \mathbf{0}$  と  $\boldsymbol{\nu}_1 = \mathbf{0}$ ) および3層2-1-2実 NN (特異点は  $\tilde{\mathbf{w}} = \mathbf{0}$  と  $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{0}$ ) を用いた. 上記1-1-1複素 NN のパラメータ数は8であり, 上記2-1-2実 NN のパラメータ数は7なので, 比較の対象としては公平であると考えられる.

重みと閾値の初期値は表2のとおりとした。中間層と出力層の間の重みの初期値は特異点の近傍の値に設定した： 複素 NN の場合は  $\nu_1 = 0.000001 + 0.000001i$ , 実 NN の場合は  $\nu_1 = 0.000001, \nu_2 = 0.000001$ . 入力層と中間層の間の重み ( $w_{11}$  または  $(w_{11}, w_{12})$ ) には8個の初期値を用いた。学習誤差が0.0001以下になったら、学習が終了したものとみなした。

Table 1 Learning patterns

(a) Learning pattern 1

Input pattern	Output pattern
1.0	$i$

(b) Learning pattern 2

Input pattern	Output pattern
$i$	$-i$

(c) Learning pattern 3

Input pattern	Output pattern
$0.1 + 0.1i$	$0.5 + 0.5i$

Table 2 Initial values of the weights and the thresholds.

(a) Complex-valued neural network

$w_{10}$	$\nu_1$	$\nu_0$	
$0.5 + 0.5i$	$0.000001 + 0.000001i$	0.0	
	case 1	case 2	case 3
$w_{11}$	-0.5	$-0.5 + 0.5i$	$0.5i$
	case 4	case 5	case 6
$w_{11}$	$0.5 + 0.5i$	0.5	$0.5 - 0.5i$
	case 7	case 8	
$w_{11}$	$-0.5i$	$-0.5 - 0.5i$	

(b) Real-valued neural network

$w_{10}$	$\nu_1$	$\nu_2$	$\nu_{10}$	$\nu_{20}$
0.5	0.000001	0.000001	0.0	0.0
	case 1	case 2	case 3	case 4
$w_{11}$	-0.5	-0.5	0.0	0.5
$w_{12}$	0.0	0.5	0.5	0.5
	case 5	case 6	case 7	case 8
$w_{11}$	0.5	0.5	0.0	-0.5
$w_{12}$	0.0	-0.5	-0.5	-0.5

上記の実験条件のもとで、学習速度を調べた。実験結果を表3に示す。これらの実験結果から、実 NN の平均学習速度は複素 NN の約 1.4 倍遅いことが分かる。数字の上付き添え字\*は、中間層と出力層の間の重みが特異点 (0 または (0, 0)) の近傍に学習の初めから終わりまで滞留したことを示す。表4は、1 回目の学習が終わった後の「中間層と出力層の間の重みの値」と「特異点 (0 または (0, 0))」との間のユークリッド距離を示している。それぞれの場合において、複素 NN の重みは実 NN の重みに比べて、特異点 0 から遠くに動いている。この現象は3章において示した  $\varphi$ (式 (22) と式 (23)) の線型結合構造に因るものと予想している。

学習パターン1と2の実験において、\*のケースの学習速度は一樣に遅い(表3)。\*のケースを除いて計算した平均学習速度は、通常平均学習速度よりも速い。\*のケースにおいて、中間層と出力層の間の重みは特異点から離れることができなかったが、その結果、学習速度は遅くなっている。また、複素 NN の\*のケースの数は1であるが、実 NN の\*のケースの数は3であり、このことは複素 NN が実 NN に比べて特異点の影響を受けにくいことを示唆している。

学習パターン3の実験において、\*のケースは無かったが、実 NN の平均学習速度は複素 NN の約 1.4 倍遅かった。表4から判断すると、複素 NN が特異点から離れる速度は実 NN に比べて速いものと思われる。その結果、学習速度の違いが生じているものと推察される。

Table 3 Learning speed (the number of learning cycles needed to converge). Case number means the initial values of the weights between the input layer and the hidden layer (See Table 2). The superscript \* of a number means that the weights between the hidden layer and the output layer stayed in the neighborhood of the singular point 0 or (0, 0) from the beginning to the end of leaning.

(a) Learning pattern 1

ケース番号	1	2	3	4	5	6
複素 NN	7	5	3	4	3	5
実 NN	13*	13*	7	5	5	5
ケース番号	7	8				
複素 NN	7	13*				
実 NN	7	13*				

ケース番号	平均	* ケースを除いた平均
複素 NN	5.9	4.9
実 NN	8.5	5.8

(b) Learning pattern 2

ケース番号	1	2	3	4	5	6
複素 NN	7	13*	7	5	3	4
実 NN	7	5	5	5	7	13*

ケース番号	7	8
複素 NN	3	5
実 NN	13*	13*

ケース番号	平均	* ケースを除いた平均
複素 NN	5.9	4.9
実 NN	8.5	5.8

(c) Learning pattern 3

ケース番号	1	2	3	4	5	6	7	8
複素 NN	7	7	6	5	5	5	6	7
実 NN	9	8	8	8	8	8	9	9

ケース番号	平均	* ケースを除いた平均
複素 NN	6.0	6.0
実 NN	8.4	8.4

Table 4 The Euclidean distances between the weights (between the hidden layer and the output layer) and the singular point 0 or (0,0) after the first learning cycle:  $|\nu_1|$  for the complex-valued network, and  $|\nu|$  for the real-valued neural network. Case number means the initial values of the weights between the input layer and the hidden layer (See Table 2).

(a) Learning pattern 1

ケース番号	1	2	3	4	5
複素 NN	0.23	0.38	0.44	0.53	0.44
実 NN	0.00	0.00	0.23	0.38	0.38

ケース番号	6	7	8	平均
複素 NN	0.38	0.23	0.00	0.33
実 NN	0.38	0.23	0.00	0.20

(b) Learning pattern 2

ケース番号	1	2	3	4	5
複素 NN	0.23	0.00	0.23	0.38	0.44
実 NN	0.23	0.38	0.38	0.38	0.23

ケース番号	6	7	8	平均
複素 NN	0.53	0.44	0.38	0.33
実 NN	0.00	0.00	0.00	0.20

(c) Learning pattern 3

ケース番号	1	2	3	4	5
複素 NN	0.21	0.21	0.23	0.25	0.25
実 NN	0.14	0.16	0.18	0.19	0.18

ケース番号	6	7	8	平均
複素 NN	0.25	0.23	0.21	0.23
実 NN	0.16	0.14	0.13	0.16

## 5 結論

特異点が複素 NN の学習ダイナミクスに与える影響について、実 NN の場合と比較しながら調べた。複素 NN の場合、学習則における線型結合構造に起因して特異点から離れやすくなっている可能性を指摘した。コンピュータシミュレーションを通して、複素 NN の場合、実 NN に比べて特異点から離れる速度が速く、また学習の収束が速いことが分かった。

本稿では単純な学習パターンと小さなネットワークを用いて実験を行った。より複雑な場合について調べていく必要がある。

## 参考文献

- 1) S. Amari, H. Park and T. Ozeki, "Singularities Affect Dynamics of Learning in Neuromanifolds," *Neural Computation*, Vol.18, 1007/1065 (2006).
- 2) N. Benvenuto and F. Piazza, "On the Complex Backpropagation Algorithm," *IEEE Trans. Sig. Proc.*, Vol.40, No.4, 967/969 (1992).
- 3) F. Cousseau, T. Ozeki and S. Amari, "Dynamics of Learning in Multilayer Perceptrons Near Singularities," *IEEE Trans. Neural Networks*, Vol.19, No.8, 1313/1328 (2008).

- 4) F. M. De Azevedo, S. S. Travessa and F. I. M. Argoud, "The Investigation of Complex Neural Network on Epileptiform Pattern Classification," Proc. The 3rd European Medical and Biological Engineering Conference (EMBEC'05), 2800/2804 (2005).
- 5) G. M. Georgiou and C. Koutsougeras, "Complex Domain Backpropagation," IEEE Trans. Circ. and Syst.-II: Analog and Dig. Sig. Proc., Vol.39, No.5, 330/334 (1992).
- 6) A. Hirose (Ed.), "Complex-Valued Neural Networks," World Scientific Publishing, Singapore (2003).
- 7) M. S. Kim and C. C. Guest, "Modification of Backpropagation Networks for Complex-Valued Signal Processing in Frequency Domain," Proc. International Joint Conference on Neural Networks, Vol.3, 27/31 (1990).
- 8) 新田徹, 古谷立美, "複素バックプロパゲーション学習," 情報処理学会論文誌, Vol.32, No.10, 1319/1329 (1991).
- 9) T. Nitta, "A Complex Numbered Version of the Back-Propagation Algorithm," Proc. World Congress on Neural Networks, Portland, Vol.3, 576/579 (1993).
- 10) T. Nitta, "An Extension of the Back-Propagation Algorithm to Complex Numbers," Neural Networks, Vol.10, No.8, 1392/1415 (1997).
- 11) T. Nitta, "Complex-Valued Neural Network and Complex-Valued Back-Propagation Learning Algorithm," In Advances in Imaging and Electron Physics, eds. Peter W. Hawkes, Elsevier, Amsterdam, The Netherlands, Vol.152, 153/221 (2008).
- 12) T. Nitta (Ed.), "Complex-Valued Neural Networks: Utilizing High-Dimensional Parameters," Information Science Reference, Pennsylvania, USA (2009).
- 13) T. Nitta, "Local Minima in Hierarchical Structures of Complex-Valued Neural Networks," Neural Networks, Vol.43, 1/7 (2013).
- 14) T. Nitta, "Learning Dynamics of the Complex-Valued Neural Network in the Neighborhood of Singular Points," Journal of Computer and Communications, Vol. 2, No. 1, 27/32 (2014).
- 15) S. Satoh and R. Nakano, "Fast and Stable Learning Utilizing Singular Regions of Multilayer Perceptron," Neural Processing Letters (2013). DOI:10.1007/s11063-013-9283-z.
- 16) 佐藤聖也, 中野良平, "複素パラメータ空間の特異領域を利用した複素多層パーセプトロン探索法," 第3回コンピュータショナル・インテリジェンス研究会講演論文集, 103/108 (2013).
- 17) H. Wei, J. Zhang, F. Cousseau, T. Ozeki and S. Amari, "Dynamics of Learning Near Singularities in Layered Networks," Neural Computation, 20, 813/843 (2008).

著作権 © 2014

公益社団法人計測自動制御学会(SICE)  
〒113-0033 東京都文京区本郷 1-35-28-303

カタログ番号 14 PG 0008

著作権は、計測自動制御学会がもっている  
ので、個人の使用のための複製以外の  
目的で掲載の記事の一部または全文を  
複製する場合には、著作権者に許可を求  
め規定の複製料を支払うこと。

発行日：2014年7月1日

発行者：公益社団法人計測自動制御学会 システム・情報部門  
コンピューターショナル・インテリジェンス部会