

8th SICE Symposium on Computational Intelligence
December 18-19, 2015, Hiroshima

第8回
コンピューターショナル・インテリジェンス研究会
講演論文集

会 期： 2015年12月18日（金），19日（土）

会 場： 県立広島大学

SICE®

カタログ番号 15 PG0014

著作権 © 2015

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 15 PG 0014

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：2015年12月18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

プログラム

講演会場: 県立広島大学広島キャンパス2棟

12月18日 3階 2317, 19日 4階 2455

12月18日(金)

13:30~15:00 高次元ニューラルネットワーク(1) 司会 新田 徹(産総研)

1. 複素多層パーセプトロンを用いたカオスの時系列の予測
○ 佐藤 聖也, 中野 良平(中部大学) . . . 1
2. 四元数ニューラルネットのロボットアーム逆運動学問題への応用
○ 小川 毅彦(拓殖大学) . . . 7
3. Algebraic Phase Unwrapping Based on Two-Dimensional Spline Smoothing
○ 北原 大地, 山田 功(東京工業大学) . . . 11

15:00~15:20 休憩

15:20~16:20 招待講演 司会 本間 経康(東北大学)

4. 幾何学的代数の要旨
金谷 健一(岡山大学名誉教授) . . . 19

16:20~16:30 休憩

16:30~18:00 クラスタリング 司会 田村 慶一(広島市立大学)

5. エイリアス状態問題に対応するためのACSMの改良
○ 林田 智弘, 西崎 一郎, 関崎 真也, 武内 宏明(広島大学) . . . 25
6. 密度に基づく空間クラスタリングを用いたジオソーシャル画像からのトピック抽出
○ 酒井 達弘, 田村 慶一(広島市立大学) . . . 31
7. SLS-SVMにおけるスパース性向上方式
○ 江渕 文人, 北村 拓也(富山高等専門学校) . . . 39

18:00~20:00 技術交流会 会場: 県立広島大学食堂

12月19日(土) 4階 2455

9:00~10:30 進化計算, ファジィ 司会 原 章 (広島市立大)

8. Geometric Semantic Genetic Programmingにおけるターゲットの意味を考慮した
交叉の提案
○ 原 章, 串田 淳一, 種村 涼, 高濱 徹行 (広島市立大学) . . . 45
9. 部分解評価を用いた対話型進化計算における定量的有効性評価
○ 松本 怜, 染谷 博司 (東海大学), 加島 智子 (近畿大学),
折登 由希子 (広島大学) . . . 50
10. 論理和によるファジィ推論モデルの提案とその性質
○ 関 宏理 (大阪大学) . . . 54

10:30~10:45 休憩

10:45~11:45 数値解析, 信号処理 司会 黒江 康明 (京都工芸繊維大学)

11. リズム現象における位相・周期感度の解析法
○ 森 禎弘, 黒江 康明 (京都工芸繊維大学) . . . 60
12. Riemannian preconditioning for tensor completion
○ 笠井 裕之 (電気通信大学), Mishra Bamdev (University of Cambridge) . . . 68

11:45~13:00 休憩

13:00~14:30 高次元ニューラルネットワーク (2) 司会 新田 徹 (産総研)

13. 量子回路対応ニューラルネットワークの時系列予測問題への適応
○ 上口 大晴, 松井 伸之, 礪川 悌次郎 (兵庫県立大学) . . . 72
14. 四元数2部グラフ自己連想記憶の想起性能評価
○ 峯本 俊文, 礪川 悌次郎 (兵庫県立大学), 小林 正樹 (山梨大学),
西村 治彦, 松井 伸之 (兵庫県立大学) . . . 77
15. 双曲勾配オペレータと双曲誤差逆伝播アルゴリズム
○ 新田 徹 (産業技術総合研究所), 黒江 康明 (京都工芸繊維大学) . . . 82

14:30~14:45 休憩

14:45~15:45 Deep Learning 司会 市村 匠 (県立広島大学)

16. ニューロン生成/消滅アルゴリズムによるRestricted Boltzmann Machineの提案
○ 鎌田 真 (広島市立大学), 市村 匠 (県立広島大学), 原 章 (広島市立大学) 90
17. 深層学習による教師なし画像の近傍空間の学習
○ 西先 崇, 濱津 文哉, 濱上 知樹 (横浜国立大学) . . . 97

15:45~16:00 休憩

16:00~18:00 ロボット, 群知能, 制御 司会 橋 完太 (工学院大学)

18. AI 帆走のためのパーティクルフィルタによるノイズ除去
○ 真鍋 秀朗, 橋 完太 (工学院大学) . . . 102
19. 軍隊アリスシステムの利他行動を取り入れたソーシャルコミュニティの成長促進に対する提案
○ 上本 拓也, 市村 匠 (県立広島大学) . . . 107
20. 相互通信と外界センサを持たないロボット少数台が示す“知的”挙動
○ 伊丹 哲郎 (ロボット産業振興会議) . . . 113
21. ふく射熱を考慮したアルミニウム板温度制御モデルに対する熱伝導率の推定
○ 細谷 直紀, 矢納 陽, 見浪 護, 松野 隆幸 (岡山大学) . . . 121

複素多層パーセプトロンを用いたカオス的時系列の予測

○佐藤聖也 中野良平 (中部大学)

Nonlinear Time Series Prediction Using Complex-Valued Multilayer Perceptron Learning

*S. Satoh and R. Nakano (Chubu University)

Abstract— A complex-valued multilayer perceptron has the capability to fit complicated periodic functions. Here we employ a strong learning method called C-SSF for learning a complex-valued multilayer perceptron since C-SSF systematically finds excellent solutions. Chaotic behavior has the aperiodic nature and is highly sensitive to initial conditions. We apply C-SSF to learning two kinds of chaotic behaviors and evaluate the learning and prediction performance of networks obtained by using C-SSF.

Key Words: Complex-valued multilayer perceptron, Singular region, Nonlinear Time Series

1 まえがき

実世界には時間と共に変化する複雑な現象が満ちているが、その系の状態遷移規則はより単純な形で記述できる可能性がある。系の状態遷移規則が決定論的であるにも関わらず、複雑な挙動を生み出す現象は決定論的カオスと呼ばれる²⁾。決定論的カオスの特徴としてフラクタル性や長期予測不可能性がある。そのため長期的な予測は不可能であるが、短期的な予測はうまくモデルを見つければ精度を向上できる。

複素ニューラルネットの一種の複素多層パーセプトロン (複素 MLP) は複素数の情報を自然に扱える上、実 MLP にない特長を有するため、様々な応用が期待されている¹⁾。複素 MLP の活性化関数は複素数をそのまま入力するタイプと複素数を実部と虚部に分けてからシグモイド関数などに入力するタイプがあるが、本稿では複素数をそのままシグモイド関数に入力する活性化関数^{3, 4)}を用いる。この活性化関数は振幅が可変な周期関数など複雑な関数を表現できるため、うまく学習すれば強力なモデルとなりえる。

複素 MLP を学習する方法として探索空間の勾配を用いる複素バックプロパゲーション法 (C-BP)^{6, 7)}や、勾配と Hesse 行列の逆行列の近似を用いる準 Newton 法の一種の複素 BFGS 法 (C-BFGS)¹⁵⁾などがある。C-BFGS は C-BP よりも効率良く探索空間を降下できるが、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や局所最適解が多数存在する問題がある。そのため、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。

隠れユニット数が J 個の複素 MLP (複素 MLP(J)) の探索空間上の特異領域は複素 MLP($J-1$) の最適解に可約性写像を適用すると形成される。このように形成された特異領域上の複素 MLP(J) の出力は、可約性写像を適用した複素 MLP($J-1$) の最適解の出力と等しく、また、このような特異領域上のほとんどの点は降下するルートが存在する鞍点である⁸⁾。この性質を利用し、特異領域を回避するのではなく、逆に利用する探索法である複素特異階段追跡法 (C-SSF: Complex Singularity Stairs Following)^{1, 3)}が提案された¹³⁾。この方法は複素 MLP($J-1$) の最適解と出力が等しい特異領域から探索空間を降下するため、隠れユニットの増加に伴って訓練誤差が単調減少する。また、現在の

探索が以前の探索経路と合流する場合は現在の探索を枝刈りする手法¹²⁾と、特異領域上の Hesse 行列の固有値を基に探索の優先順位を決定し、探索数の上限を設定する手法¹³⁾により高速化された。文献¹³⁾の計算機実験では、初期点をランダムに設定して C-BFGS を用いて 100 回試行する方法よりも高速で、かつより良い解が得られた。

本稿では生成される挙動が決定論的カオスとされるローレンツ方程式⁵⁾と 2 重振り子¹⁴⁾のモデルを用いて、C-SSF1.3 の性能を評価する。比較する探索法は C-BFGS とし、また実 MLP とも比較する。実 MLP の探索法は準 Newton 法の一種の BPQ¹⁰⁾と C-SSF1.3 の実 MLP バージョンである SSF1.4¹¹⁾を用いる。

2 複素多層パーセプトロン

2.1 目的関数

隠れユニットが J 個、出力ユニットが 1 個の複素 MLP (複素 MLP(J)) の出力は、実 MLP と同様以下のように表せる。ただし、 $\theta_J = \{w_0, w_j, \mathbf{w}_j, j = 1, \dots, J\}$ とし、実 MLP とは異なり重みや入出力は全て複素数とする。

$$f_J(\mathbf{x}; \theta_J) = w_0 + \sum_{j=1}^J w_j z_j, \quad z_j \equiv g(\mathbf{w}_j^T \mathbf{x}) \quad (1)$$

目的関数としては以下がよく用いられる。ただし、学習データは $\{\mathbf{x}^\mu, y^\mu, \mu = 1, \dots, N\}$ とし、 $\bar{\delta}^\mu$ は δ^μ の共役複素数とする。

$$E_J^{(c)} = \sum_{\mu=1}^N \delta^\mu \bar{\delta}^\mu, \quad \delta_J^\mu \equiv f_J(\mathbf{x}^\mu; \theta_J) - y^\mu \quad (2)$$

また、 y^μ の実部のみを考慮する場合は以下とすることで f^μ の虚部を任意とでき、C-MLP の近似能力を向上できる。

$$E_J^{(r)} = \frac{1}{2} \sum_{\mu=1}^N (\delta^\mu + \bar{\delta}^\mu)^2 \quad (3)$$

2.2 可約性写像と特異領域

本節では、複素 MLP($J-1$) の最適解に可約性写像を適用して得られた複素 MLP(J) の探索空間の一部が特異領域となることを簡単に説明する。

ここで、複素 MLP($J - 1$) の重みを $\theta_{J-1} = \{u_0, u_j, \mathbf{u}_j, j = 1, \dots, J - 1\}$ とする. その出力は以下である.

$$f_{J-1}(\mathbf{x}; \theta_{J-1}) = u_0 + \sum_{j=1}^{J-1} u_j v_j, \quad v_j \equiv g(\mathbf{u}_j^T \mathbf{x}) \quad (4)$$

ここで、複素 MLP($J - 1$) の最適解を $\hat{\theta}_{J-1} = \{\hat{u}_0, \hat{u}_j, \hat{\mathbf{u}}_j, j = 1, \dots, J - 1\}$ とし, $\hat{\theta}_{J-1}$ に 3 種の可約性写像 α, β, γ 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.

$$\hat{\theta}_{J-1} \xrightarrow{\alpha} \hat{\Theta}_J^\alpha, \quad \hat{\theta}_{J-1} \xrightarrow{\beta} \hat{\Theta}_J^\beta, \quad \hat{\theta}_{J-1} \xrightarrow{\gamma} \hat{\Theta}_J^\gamma$$

$$\hat{\Theta}_J^\alpha \equiv \{\theta_J \mid w_0 = \hat{u}_0, w_1 = 0, w_j = \hat{u}_{j-1}, \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{u}}_{j-1}, j = 2, \dots, J\} \quad (5)$$

$$\hat{\Theta}_J^\beta \equiv \{\theta_J \mid w_0 + w_1 g(w_{10}) = \hat{u}_0, \mathbf{w}_1 = (w_{10}, 0, \dots, 0)^T, w_j = \hat{u}_{j-1}, \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{u}}_{j-1}, j = 2, \dots, J\} \quad (6)$$

$$\hat{\Theta}_J^\gamma \equiv \{\theta_J \mid w_0 = \hat{u}_0, w_1 + w_m = \hat{u}_{m-1}, \mathbf{w}_1 = \mathbf{w}_m = \hat{\mathbf{u}}_{m-1}, w_j = \hat{u}_{j-1}, \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{u}}_{j-1}, j \in \{2, \dots, J\} \setminus \{m\}\} \quad (7)$$

ただし, $m = 2, \dots, J$ とする. $\hat{\Theta}_J^\alpha, \hat{\Theta}_J^\beta, \hat{\Theta}_J^\gamma$ の領域の内, 目的関数の勾配がゼロの連続領域 (特異領域) は以下の二つの領域である.

(1) 領域 $\hat{\Theta}_J^\alpha$ と $\hat{\Theta}_J^\beta$ が重なる領域は w_{10} が任意の特異領域である. ここでは以下が成立するこの領域を $\hat{\Theta}_J^{\alpha\beta}$ とする.

$$w_0 = \hat{u}_0, \quad w_1 = 0, \quad \mathbf{w}_1 = (w_{10}, 0, \dots, 0)^T \\ w_j = \hat{u}_{j-1}, \quad \mathbf{w}_j = \hat{\mathbf{u}}_{j-1}, \quad j = 2, \dots, J \quad (8)$$

(2) 領域 $\hat{\Theta}_J^\gamma$ は, 以下の式を満たす特異領域である.

$$w_1 + w_m = \hat{u}_{m-1} \quad (9)$$

3 複素特異階段追跡法 1.3

複素特異階段追跡法 1.3(C-SSF1.3)¹³⁾ は上記の特異領域を探索の初期点として利用して探索する方法である. そのためこの方法は隠れユニットの増加に伴った訓練誤差の単調減少が保証されており, 良質の解を得ることができる.

3.1 特異領域からの探索

特異領域は勾配がゼロであるため, 勾配を利用した従来の探索法では探索を開始することが出来ない. そのため, C-SSF1.3 では, 最初の重みの更新のときのみ Hesse 行列の固有ベクトルを利用して探索空間を降下する. 特異領域での固有ベクトルの概念図を Fig. 1 に示す (図中の固有ベクトルは, 実際には直交している.). これらの固有ベクトルの中で, 負の固有値に対応する固有ベクトルは, 特異領域から降下する方向を向いているので, その方向に重みを更新することで探索を開

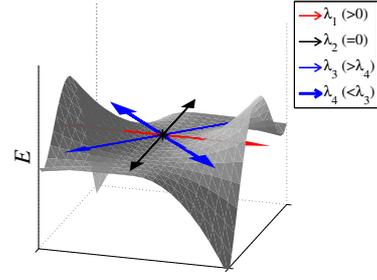


Fig. 1: Eigenvectors on a singular region.

始できる. 以下の計算機実験では固有ベクトル方向への探索幅はバックトラッキング法⁹⁾を用いて決定した. 探索幅の初期値は 1 とし, 誤差が減少しなければ半分にし, 減少すれば重みを更新するようにした.

3.2 高速化手法

C-SSF1.3 は複素 MLP($J - 1$) の最適解に可約性写像を適用して形成された特異領域から探索空間を降下するため, 訓練誤差を単調減少させられるが, 隠れユニットの増加とともに探索空間の次元が増え, 特異領域も増えるため, 全ての特異領域から探索すると処理負荷が増大してしまう. この問題を解決するため, C-SSF1.3 では現在の探索が以前の探索経路と合流する場合は現在の探索を枝刈りする手法¹²⁾と, 特異領域上の Hesse 行列の固有値を基に探索の優先順位を決定し, 探索数の上限を設定する手法¹³⁾を用いる.

3.2.1 探索枝刈り手法

以下の計算機実験では固有ベクトル方向 (またはその逆方向) へ重みを更新後の解の探索は準 Newton 法の一環の C-BFGS¹⁵⁾を用いたが, その探索中は探索枝刈り判定を行う. 探索枝刈りの閾値 ϵ は 0.3, 探索枝刈りの判定と重みの記録は探索ステップ数が $\{100n, n = 1, \dots\}$ のときとした. 探索枝刈り処理の詳細は文献¹²⁾を参照されたい.

3.2.2 探索数削減による高速化

Fig. 1 に示すように, 負の固有値の内, 固有値が小さいほどその固有値に対応する固有ベクトル方向の探索空間のたわみが急であると考えられる. そのため, 負の固有値が小さいほど, 対応する固有ベクトル方向に探索を行うことでより小さい訓練誤差の解が得られる傾向があると考えられる. そのため, 以下の C-SSF1.3 の処理の流れに示すように, 小さい固有値から順に選択して探索し, 設定した探索数の上限に到達したとき処理を終了して高速化する.

3.3 複素特異階段追跡法 1.3 の処理の流れ

C-SSF1.3 の処理の流れを以下に示す. 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 $\{w_0^{(J)}, w_j^{(J)}, \mathbf{w}_j^{(J)}\}$ とする.

C-SSF1.3 の処理の流れ

- 1: 隠れユニットが 0 個のときの全域最適解を求める.
($\hat{w}_0^{(0)} \leftarrow 1/N \sum_{\mu=1}^N y^\mu$)
- 2: for $J = 1, \dots, J_{max}$ do

- 3: 複素 MLP($J-1$) の探索で得られた最良解に可約性写像を適用して初期点を特異領域上に設定し, Hesse 行列の固有値と固有ベクトルを求める.
- 4: **while** 終了条件を満たすまで以下を繰り返す.
do
- 5: Step 3 で計算した負の固有値の中で最も小さい固有値から順に選択し, その固有値に対応する固有ベクトル方向とその逆方向に探索空間を降下して解を探索する.
- 6: **end while**
- 7: **end for**

以下の計算機実験では Step 3 で利用する特異領域は $\hat{\Theta}_J^{\alpha\beta}$ と $\hat{\Theta}_J^\gamma$ とした. 初期点を $\hat{\Theta}_J^{\alpha\beta}$ 上に設定する方法は以下とした. ただし, 複素 MLP($J-1$) の探索で得られた解を $\{\hat{w}_0^{(J-1)}, \hat{w}_j^{(J-1)}, \hat{w}_j^{(J-1)}\}$ とする.

$$\begin{aligned} w_0^{(J)} &\leftarrow \hat{w}_0^{(J-1)}, w_1^{(J)} \leftarrow 0, \\ \mathbf{w}_1^{(J)} &\leftarrow (p, 0, \dots, 0)^T, \\ w_j^{(J)} &\leftarrow \hat{w}_{j-1}^{(J-1)}, \mathbf{w}_j \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_{j-1}^{(J-1)}, j=2, \dots, J \end{aligned}$$

p は複素数であるが, ここでは $p = -1, 0, 1$ の 3 点とした. $\hat{\Theta}_J^\gamma$ 上に設定する方法は以下とした. ただし, $m = 2, \dots, J$ とする.

$$\begin{aligned} w_0^{(J)} &\leftarrow \hat{w}_0^{(J-1)}, w_1^{(J)} \leftarrow q \times \hat{w}_{m-1}^{(J-1)}, \\ w_m^{(J)} &\leftarrow (1-q) \times \hat{w}_{m-1}^{(J-1)}, \\ \mathbf{w}_1^{(J)} &\leftarrow \hat{\mathbf{w}}_{m-1}^{(J-1)}, \mathbf{w}_m^{(J)} \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_{m-1}^{(J-1)}, \\ w_j^{(J)} &\leftarrow \hat{w}_{j-1}^{(J-1)}, \mathbf{w}_j \leftarrow \hat{\mathbf{w}}_{j-1}^{(J-1)}, \\ j &\in \{2, \dots, J\} \setminus \{m\} \end{aligned}$$

q も複素数であるが, ここでは $q = 0.5, 1.0, 1.5$ (それぞれ内分点, 内分と外分の境界点, 外分点) の $3 \times (J-1)$ 点とした. Step 5 の終了条件は探索枝刈りされた探索も含めて探索数が 100 となるか, 負の固有値が無くなったときとした.

4 計算機実験

決定論的カオス挙動を示すローレンツ方程式⁵⁾と 2 重振り子¹⁴⁾を用いて C-SSF1.3 の性能を評価する計算機実験を行った.

比較する従来法は, 準 Newton 法の一つである C-BFGS¹⁵⁾とした. C-BFGS 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.

また, 実 MLP とも比較した. 探索法としては準 Newton 法の一つの BPQ¹⁰⁾と C-SSF1.3 の実 MLP バージョンである SSF1.4¹¹⁾とした. BPQ の初期重みは区間 $(-1, +1)$ の中からランダムに選択し, 各 J で 100 回の試行を行った. SSF1.4 では固有ベクトル方向へ重みを更新後の探索は BPQ を用い, それ以外の設定 (特異領域上の初期値など) は全て C-SSF1.3 と同じとした.

実 MLP, 複素 MLP の各試行の終了条件は, スイープ回数が 1 万回を越えるか, 探索幅が 10^{-16} 以下となった場合とした.

複素 MLP の活性化関数としては以下の活性化関数を用いた^{3, 4)}. ただし, $c = a + ib$, $i = \sqrt{-1}$ とする.

$$\begin{aligned} \sigma(c) &= \frac{1}{1 + e^{-c}} \\ &= \frac{1 + e^{-a} \cos b + ie^{-a} \sin b}{1 + 2e^{-a} \cos b + e^{-2a}} \end{aligned} \quad (10)$$

この活性化関数は, 特異点を含む正則関数であるが, 振幅が可変な周期関数など, 複雑な関数を表現できる. 実 MLP の活性化関数はシグモイド関数とした.

複素 MLP は複素数を入力できるが, 以下の実験では全て実数を入力した. また, 複素 MLP と実 MLP 共に出力ユニットは一つとし, 複素 MLP の出力ユニットは実部のみを考慮する式 (3) の目的関数を用いて学習を行った. 実 MLP の目的関数は 2 乗和誤差とした.

訓練誤差とテスト誤差は複素 MLP と実 MLP 共に以下の MSE とした.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{\mu=1}^N (\text{Re}(f^\mu) - y^\mu)^2 \quad (11)$$

プログラミング言語は MATLAB R2014a を用いた.

4.1 ローレンツ方程式

ローレンツ方程式を以下に示す.

$$\frac{dx}{dt} = \sigma(y - x) \quad (12)$$

$$\frac{dy}{dt} = x(\rho - z) - y \quad (13)$$

$$\frac{dz}{dt} = xy - \beta z \quad (14)$$

ρ, σ, β はそれぞれ 28, 10, 8/3, x, y, z の初期値はそれぞれ $-10, -10, 30$, Δt は 0.05 とした. ここでは時刻 t の点 $\mathbf{p}_t \equiv (x_t, y_t, z_t)^T$ を入力し, $\mathbf{p}_{t+\Delta t}$ を予測するように MLP を学習する問題とした. MLP の出力ユニットは 1 つとし, $x_{t+\Delta t}, y_{t+\Delta t}, z_{t+\Delta t}$ をそれぞれ予測するため 3 つの MLP を用いた. 以下にそれぞれの訓練データを示す. ただしサンプル数 N_{tr} は 300 とした.

- $\{(\mathbf{p}_{(\mu-1)\Delta t}, x_{\mu\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{tr}\}$
- $\{(\mathbf{p}_{(\mu-1)\Delta t}, y_{\mu\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{tr}\}$
- $\{(\mathbf{p}_{(\mu-1)\Delta t}, z_{\mu\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{tr}\}$

テストデータは, 以下に示すように, $t = N_{tr}\Delta t$ 以降とし, サンプル数 N_{test} は 200 とした.

- $\{(\mathbf{p}_{(N_{tr}+\mu-1)\Delta t}, x_{(N_{tr}+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{test}\}$
- $\{(\mathbf{p}_{(N_{tr}+\mu-1)\Delta t}, y_{(N_{tr}+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{test}\}$
- $\{(\mathbf{p}_{(N_{tr}+\mu-1)\Delta t}, z_{(N_{tr}+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{test}\}$

考慮する隠れユニットの最大数は複素 MLP は 15, 実 MLP は 30 とした.

Fig. 2 に各 J で得られた最小の訓練誤差を示す. 図の縦軸は対数表示とした. BPQ と C-BFGS では J を増やすと逆に訓練誤差が増加することがあった. SSF1.4 と C-SSF1.3 では, 隠れユニットの増加に伴って訓練誤

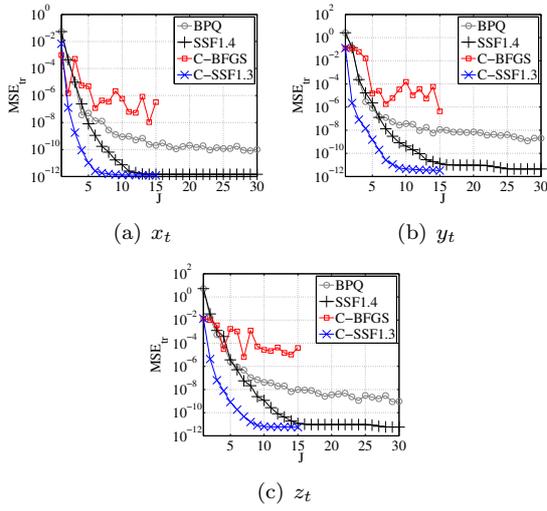


Fig. 2: Training errors for Lorenz equation.

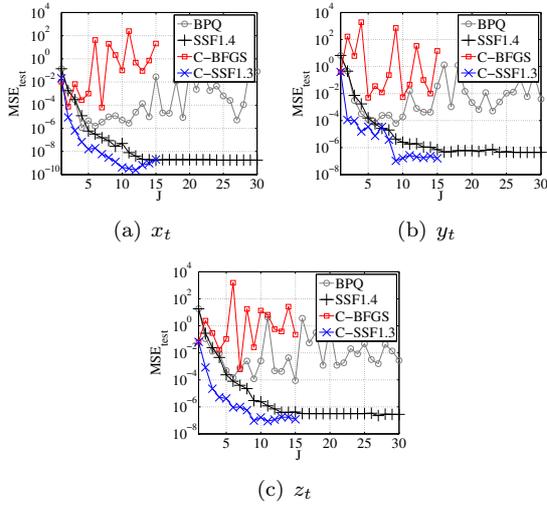


Fig. 3: Test errors for Lorenz equation.

差が単調減少し、 x_t, y_t, z_t に対する最小 MSE はどちらも 10^{-11} 以下となった。

Fig. 3 に最小訓練誤差の解のテスト誤差を示す。 x_t, y_t, z_t に対するテスト誤差は全て C-SSF1.3 が最小となり、次いで SSF1.4, BPQ, C-BFGS の順となった。

Fig. 4 に処理時間を示す。BPQ, SSF1.4, C-BFGS,

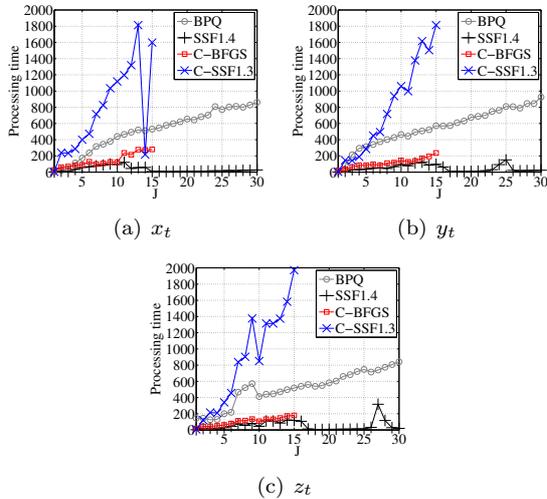


Fig. 4: Processing time for Lorenz equation.

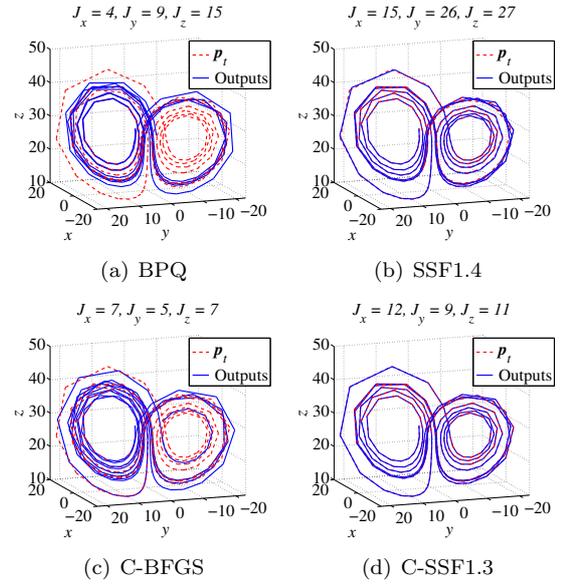


Fig. 5: Free-run prediction for Lorenz equation.

C-SSF1.3 の合計時間はそれぞれ 13.1, 1.13, 1.51, 10.0 時間となり、SSF1.4 が最も早く、BPQ が最も時間がかかった。

BPQ, SSF1.4, C-BFGS, C-SSF1.3 の x_t, y_t, z_t に対するテスト誤差が最小の隠れユニット数 (J_x, J_y, J_z) はそれぞれ (4, 9, 15), (15, 26, 27), (7, 5, 7), (12, 9, 11) となった。このときの MLP に $\mathbf{p}_{N_{tr}\Delta t}$ のみを与えて $\mathbf{p}_{(N_{tr}+1)\Delta t}, \mathbf{p}_{(N_{tr}+2)\Delta t}, \dots, \mathbf{p}_{(N_{tr}+N_{test})\Delta t}$ を順にフリーラン予測した。フリーラン予測では、 $t = (N_{tr} + 1)\Delta t$ 以降の正しい \mathbf{p}_t は与えず、それらに対応する MLP の予測値を MLP の入力として利用した。Fig. 5 にフリーラン予測の結果を示す。このときの BPQ, SSF1.4, C-BFGS, C-SSF1.3 の MSE はそれぞれ 238.82, 0.28, 283.78, 0.01 となった。BPQ と C-BFGS は予測が大幅にずれていることがわかる。SSF1.4 と C-SSF1.3 はうまく予測できたが、C-SSF1.3 の予測の方が正確である。

4.2 2重振り子

Fig. 6 に示す 2 重振り子を用いて実験を行った。ここで一つ目の棒の始点は (0, 0), 棒の長さは l_1 , 棒の先端の重りの重さは m_1 とし、棒自体の質量は 0 とした。棒の角度 θ は真下を向いているときを 0° とした。二つ目の棒の始点は一つ目の棒の先端とし、長さは l_2 , 先端の重りは m_2 とした。棒の角度 ϕ は一つ目と同様、真下を向いているときを 0° とした。

この 2 重振り子のラグランジュ関数 L は以下である。ただし、 T は運動エネルギー、 U はポテンシャルエネルギーとし、 $\dot{\theta} = \frac{d\theta}{dt}, \dot{\phi} = \frac{d\phi}{dt}, M = m_1 + m_2, \psi = \theta - \phi$ とする。

$$L = T - U, \quad (15)$$

$$T = \frac{1}{2} M l_1^2 \dot{\theta}^2 + \frac{1}{2} m_2 l_2^2 \dot{\phi}^2 + m_2 l_1 l_2 \dot{\theta} \dot{\phi} \cos \psi, \quad (16)$$

$$U = -M g l_1 \cos \theta - m_2 g l_2 \cos \phi \quad (17)$$

ラグランジュの方程式は以下である。

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}_1} \right) - \frac{\partial L}{\partial \theta_1} = 0, \quad \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}_2} \right) - \frac{\partial L}{\partial \theta_2} = 0 \quad (18)$$

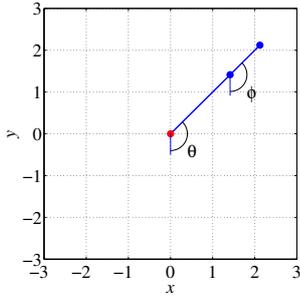


Fig. 6: Initial position of double pendulum.

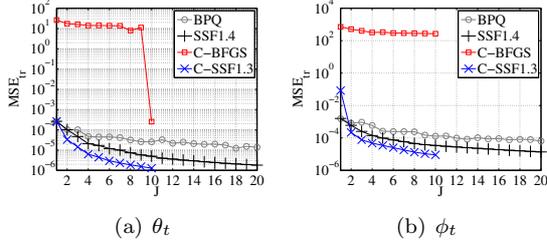


Fig. 7: Training errors for double pendulum.

上記式を $\ddot{\theta} (\equiv \frac{d^2\theta}{dt^2})$, $\ddot{\phi} (\equiv \frac{d^2\phi}{dt^2})$ について解くと以下を得る.

$$\ddot{\theta} = \frac{\{g(m_2 \sin \phi \cos \psi - M \sin \theta) - m_2(l_1 \dot{\theta}^2 \cos \psi + l_2 \dot{\phi}^2) \sin \psi\}}{\{l_1(M - m_2 \cos^2 \psi)\}} \quad (19)$$

$$\ddot{\phi} = \frac{\{Mg(\sin \theta \cos \psi - \sin \phi) + (m_2 l_2 \dot{\phi}^2 \cos \psi + M l_1 \dot{\theta}^2) \sin \psi\}}{\{l_2(M - m_2 \cos^2 \psi)\}} \quad (20)$$

m_1, m_2, l_1, l_2, g はそれぞれ 1, 1, 2, 1, 9.8 とし, $\theta, \phi, \dot{\theta}, \dot{\phi}$ の初期値は $3/4\pi, 3/4\pi, -2, 2$, Δt は 0.05 とした. ここでは以下を入力とし, $\theta_{t+\Delta t}, \phi_{t+\Delta t}$ を予測するように MLP を学習する問題とした.

$$\mathbf{q}_t \equiv (\theta_{t-9\Delta t}, \theta_{t-8\Delta t}, \dots, \theta_t, \phi_{t-9\Delta t}, \phi_{t-8\Delta t}, \dots, \phi_t)^T$$

4.1 節と同様, MLP の出力ユニットは 1 つとし, $\theta_{t+\Delta t}, \phi_{t+\Delta t}$ をそれぞれ予測するため 2 つの MLP を用いた. 以下にそれぞれの訓練データを示す. サンプル数 N_{tr} は 10,000 とした.

- $\{(\mathbf{q}_{(8+\mu)\Delta t}, \theta_{(9+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{tr}\}$
- $\{(\mathbf{q}_{(8+\mu)\Delta t}, \phi_{(9+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{tr}\}$

テストデータは, 以下に示すように, $t = 20,000\Delta t$ 以降とし, サンプル数 N_{test} は 100 とした.

- $\{(\mathbf{q}_{(20,008+\mu)\Delta t}, \theta_{(20,009+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{test}\}$
- $\{(\mathbf{q}_{(20,008+\mu)\Delta t}, \phi_{(20,009+\mu)\Delta t}), \mu = 1, \dots, N_{test}\}$

考慮する隠れユニットの最大数は複素 MLP は 10, 実 MLP は 20 とした.

Fig. 7 に各 J で得られた最小の訓練誤差を示す. 図の縦軸は対数表示とした. C-BFGS は常に MSE が最大であった. これは複素 MLP の探索空間の方が実 MLP

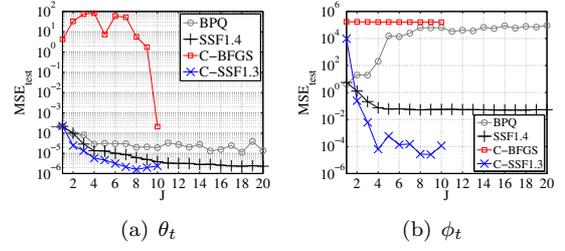


Fig. 8: Test errors for double pendulum.

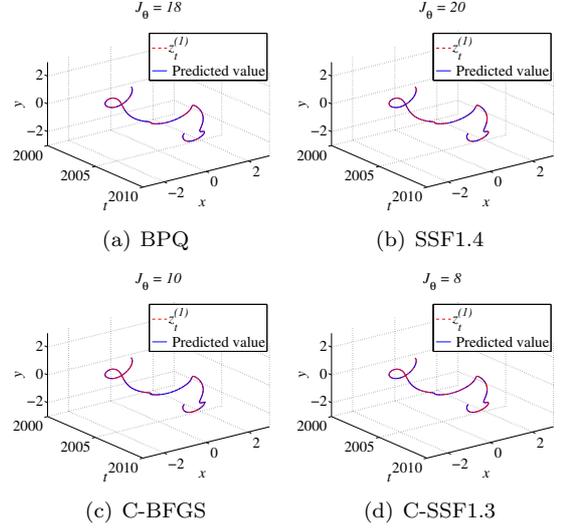


Fig. 9: Test data prediction of θ for double pendulum.

よりも探索が困難な形状をしていたためと考えられる. 一方, C-SSFL1.3 は BPQ や SSFL1.4 よりも小さい訓練誤差の解を得た.

Fig. 8 に最小訓練誤差の解のテスト誤差を示す. 4.1 節の結果と同様, θ_t, ϕ_t に対するテスト誤差はどちらにおいても C-SSFL1.3 が最小となり, 次いで SSFL1.4, BPQ, C-BFGS の順となった.

BPQ, SSFL1.4, C-BFGS, C-SSFL1.3 の θ_t, ϕ_t に対するテスト誤差が最小となるモデルのテストデータに対する出力を Fig. 9, 10 に示す. ただし, 以下のように角度 θ_t, ϕ_t を (x, y) 平面に変換した値 $z_t^{(1)}, z_t^{(2)}$ を表示した.

$$z_t^{(1)} = x_t^{(1)} + iy_t^{(1)}, z_t^{(2)} = x_t^{(2)} + iy_t^{(2)}, \quad (21)$$

$$x_t^{(1)} = l_t^{(1)} \sin \theta_t, x_t^{(2)} = x_t^{(1)} + l_t^{(2)} \sin \phi_t, \quad (22)$$

$$y_t^{(1)} = -l_t^{(1)} \cos \theta_t, y_t^{(2)} = y_t^{(1)} - l_t^{(2)} \cos \phi_t \quad (23)$$

Fig. 9, 10 に示すように θ_t の予測結果はどの探索法でもほとんど変わらないが, ϕ_t の予測結果は C-SSFL1.3 が最も精度が良く, 次いで SSFL1.4 がよく予測できていることがわかる.

Fig. 11 に処理時間を示す. BPQ, SSFL1.4, C-BFGS, C-SSFL1.3 の合計時間はそれぞれ 67.8, 14.1, 4.62, 16.1 時間となり, C-BFGS が最も早く, BPQ が最も時間がかかった.

BPQ, SSFL1.4, C-BFGS, C-SSFL1.3 の θ_t, ϕ_t に対するテスト誤差が最小の隠れユニット数 (J_θ, J_ϕ) はそれぞれ (18, 1), (20, 18), (10, 10), (8, 9) となった. このときの MLP に $\mathbf{q}_{20,009\Delta t}$ のみを与えて $\theta_{20,010\Delta t}, \theta_{20,011\Delta t}, \dots, \theta_{20,019\Delta t}, \phi_{20,010\Delta t}, \phi_{20,011\Delta t}, \dots, \phi_{20,019\Delta t}$ を順にフリーラン予測した. フリーラン予測では, $t =$

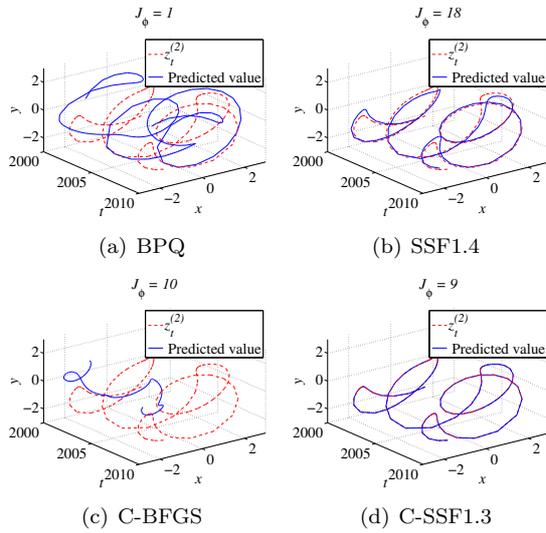


Fig. 10: Test data prediction of ϕ for double pendulum.

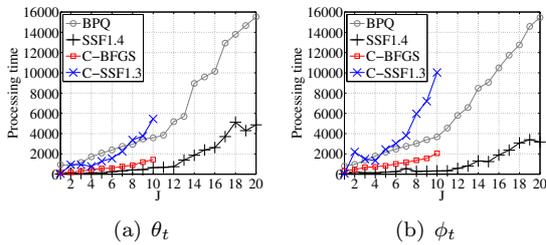


Fig. 11: Processing time for double pendulum.

20, 010 Δt 以降の正しい θ_t, ϕ_t は与えず、それらに対応する MLP の出力を MLP の入力として利用した。Fig. 12 にフリーラン予測の結果を示す。図から C-SSF1.3 のみがうまく予測できていることがわかる。

5 まとめ

本稿では生成される挙動が決定論的カオスとされるローレンツ方程式と 2 重振り子のモデルを用いて、C-SSF1.3 の性能を評価した。

どちらの実験においても準 Newton 法の一種の BPQ と C-BFGS では隠れユニットを増加しても訓練誤差が減少しないことがあり、良質の解が得られなかったが、

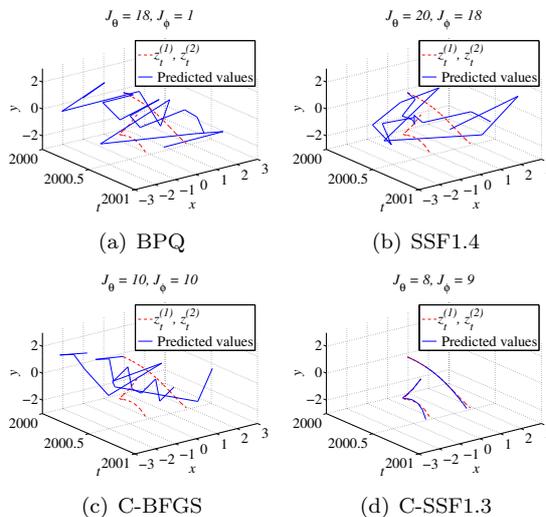


Fig. 12: Free-run prediction for double pendulum.

SSF1.4 と C-SSF1.3 では訓練誤差が単調減少し、ローレンツ方程式の実験では 200 Δt 先までうまくフリーラン予測できた。2 重振り子の実験の Δt 先を予測するテストでは SSF1.4 は少しずれているが、C-SSF1.3 ではうまく予測できた。また、10 Δt 先までのフリーラン予測においても C-SSF1.3 はうまく予測できた。

今後の課題としてはカオスの挙動のフリーラン予測の精度をより長期に渡って向上することが挙げられる。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 25330294, 26-7159 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) Hirose, A. (ed.) : Complex-valued neural networks, 2nd ed., Springer (2012).
- 2) 池口徹, 山田泰司, 小室元政, 合原一幸 (編) : カオス時系列解析の基礎と応用, 産業図書, (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) E.N. Lorenz: Deterministic nonperiodic flow, Journal of the Atmospheric Sciences, **20**(2), 130/141 (1963)
- 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) J. Nocedal, and S. Wright: Numerical optimization, Springer Science and Business Media, (2006)
- 10) K. Saito, and R. Nakano, "Partial BFGS update and efficient step-length calculation for three-layer neural networks," Neural Comput., **9**(1), 239/257 (1997)
- 11) 佐藤聖也, 中野良平 : 特異階段追跡法の一層の高速化と解品質の改善, ニューロコンピューティング研究会, 289/294 (2015)
- 12) S. Satoh, and R. Nakano: Complex-valued multilayer perceptron learning using singular regions and search pruning, Proc. IJCNN, 1/6 (2015)
- 13) S. Satoh, and R. Nakano: A yet faster version of complex-valued multilayer perceptron learning using singular regions and search pruning, Proc. NCTA, (to be published) (2015)
- 14) T. Shinbrot, C. Grebogi, J. Wisdom, and J.A. Yorke: Chaos in a double pendulum, American Journal of Physics, **60**(6), 491/499 (1992)
- 15) 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)

四元数ニューラルネットのロボットアーム逆運動学問題への応用

小川毅彦 (拓殖大学)

Application of Quaternion Neural Network to Inverse Kinematics of Robot Arm

* T. Ogawa (Takushoku University)

Abstract— Quaternions are often used to express mechanics in three dimensional space. The estimation problem of the joint angles from a given end-effector coordinate is referred to as an inverse kinematics of robot arm, which is an inverse problem. A multilayered neural network based solution to inverse problem has been proposed and has been extended to quaternion neural networks. In this paper, we apply the quaternion neural network based solution to the inverse kinematics of robot arm.

Key Words: Quaternions, Multilayered neural network, Inverse kinematics.

1 はじめに

近年、高次元数を扱うためのニューラルネットモデルが研究されている。中でも四元数は、三次元空間における代数表現が容易に可能なため、コンピュータグラフィックスなどの分野で注目されている。モデルとしては、層状モデルやリカレント型、ホップフィールド型などさまざまなものが提案されている¹⁾²⁾。

観測結果から原因を求める問題は逆問題³⁾と呼ばれ、さまざまな分野で研究が行われている。そのニューラルネット解法としてインバージョン法が研究され⁴⁾、さらに四元数への拡張が提案されている⁵⁾。

多関節ロボットアームに対し、与えられた手先座標を実現する関節角を求める問題は逆運動学と呼ばれ逆問題の1つである⁶⁾。ニューラルネットを用いた逆運動学の解法として、関節角と手先座標の多数の組を学習データとして学習し、学習済みネットワークを用いて任意の手先座標に対応する関節角を逆推定する方法が提案されている⁷⁾。

本研究では、多関節ロボットアームの逆運動学問題に、四元数ニューラルネットによる逆問題解法を適用する。関節角と先端座標を四元数として表現し、四元数に拡張したインバージョン法を用いて、与えられた先端座標に対応する関節角を推定する。3自由度ロボットアームを用いてシミュレーションを行い、効果を示す。

2 四元数とニューラルネット

四元数は1つの実部と3つの虚部からなる高次元数である。虚数単位を i, j, k とすると、 $\mathbf{x} = x_0 + ix_1 + jx_2 + kx_3$ と表現できる。ただし x_0, x_1, x_2, x_3 は実数であり四元数の各成分を表す。また、

$$\begin{aligned} i^2 = j^2 = k^2 = ijk = -1, \\ ij = -ji = k, jk = -kj = i, ki = -ik = j \end{aligned} \quad (1)$$

である。また、四元数は乗法に関して結合則を満たすが交換則を満たさないという特徴がある。

四元数を用いると、3次元空間の任意回転を容易に表現できる。例えば回転角 θ 、回転軸 $\mathbf{n} = in_1 + jn_2 + kn_3$ の回転を表す四元数は、

$$\mathbf{q} = \cos\theta/2 + \mathbf{n}\sin\theta/2 \quad (2)$$

となる。これに対して、回転行列を用いた3次元空間内の回転の場合、 x, y, z 軸の単位ベクトル $\mathbf{e}_1 = [1, 0, 0]^T$, $\mathbf{e}_2 = [0, 1, 0]^T$, $\mathbf{e}_3 = [0, 0, 1]^T$ が $\mathbf{e}'_1 = [r_{11}, r_{21}, r_{31}]^T$, $\mathbf{e}'_2 = [r_{12}, r_{22}, r_{32}]^T$, $\mathbf{e}'_3 = [r_{13}, r_{23}, r_{33}]^T$ に移動したとすると、回転行列は

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} \end{bmatrix} \quad (3)$$

と表され、四元数による表現より多くのパラメータを必要とする。任意軸 $\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3)$ 周りの θ 回転行列は、

$$\mathbf{R}_n = \begin{bmatrix} n_1^2(1-C) + C & n_1n_2(1-C) + n_3S & n_1n_3(1-C) - n_2S \\ n_1n_2(1-C) + n_3S & n_2^2(1-C) + C & n_2n_3(1-C) + n_1S \\ n_1n_3(1-C) + n_2S & n_2n_3(1-C) - n_1S & n_3^2(1-C) + C \end{bmatrix} \quad (4)$$

となる。ただし、 $S = \sin\theta/2$, $C = \cos\theta/2$ とする。一方、(2) の四元数を用いて、 $x_0 = \cos\theta/2$, $x_1 = n_1 \sin\theta/2$, $x_2 = n_2 \sin\theta/2$, $x_3 = n_3 \sin\theta/2$ とすると、回転行列は、

$$\mathbf{R}_n = \begin{bmatrix} 1 - 2x_2^2 - 2x_3^2 & 2x_1x_2 + 2x_0x_3 & 2x_1x_3 - 2x_0x_2 \\ 2x_1x_2 - 2x_0x_3 & 1 - 2x_1^2 - 2x_3^2 & 2x_2x_3 + 2x_0x_1 \\ 2x_1x_3 + 2x_0x_2 & 2x_2x_3 + 2x_0x_1 & 1 - 2x_2^2 - 2x_3^2 \end{bmatrix} \quad (5)$$

となり、四元数と回転行列の変換ができる⁸⁾。

四元数を用いることのメリットとして、回転行列よりも少ないパラメータで回転を表現できることと、球面上の線形補間が可能であることが挙げられる。

2.1 多層型四元数ニューラルネット

四元数に拡張されたニューラルネットモデルとしてさまざまなものが提案されている。多層型のモデルでは、四元数の荷重と四元数ニューロンを用いて、四元数に拡張された入出力間の関係を学習できる。本研究では階層型の四元数ニューラルネットを対象とする。

入力、荷重および出力を四元数に拡張した多層型ニューラルネットを考える。本研究では四元数入力の各部にシグモイド関数を用いる各部独立型のニューロンを考える。すなわち、 $\mathbf{s} = s_0 + is_1 + js_2 + ks_3$ に対して

$$f(\mathbf{s}) = f(s_0) + if(s_1) + jf(s_2) + kf(s_3), \quad f(u) = \frac{1 - e^{-u}}{1 + e^{-u}}, \quad (6)$$

とし、これを中間層・出力層に用いる3層型のネットワークを考える。学習時は、四元数に拡張された誤差逆伝搬法により、四元数学習入出力データを用いて荷重の更新を行う。誤差関数は四元数出力の2乗誤差

$$E = \frac{1}{2} \sum_r \|\mathbf{d}_r - \mathbf{y}_r\|^2 \quad (7)$$

とする。ここで \mathbf{d}_r および \mathbf{y}_r は、それぞれ r 番目素子に与えられた出力とネットワーク出力を表す。さらに中間・出力層間荷重の修正量 $\Delta \mathbf{w}_{qr}$ および、入力・中間層間荷重の修正量 $\Delta \mathbf{w}_{pq}$ はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{w}_{qr} &= ((\mathbf{d}_r - \mathbf{y}_r) \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{y}_r) \cdot (\mathbf{1} + \mathbf{y}_r)) \cdot \overline{\mathbf{v}_q}, \\ \Delta \mathbf{w}_{pq} &= \left((\mathbf{1} - \mathbf{v}_q) \cdot (\mathbf{1} + \mathbf{v}_q) \cdot \sum_r \delta_r \cdot \overline{\mathbf{w}_{qr}} \right) \cdot \overline{\mathbf{x}_p}, \end{aligned} \quad (8)$$

と計算できる。ただし、

$$\delta_r = (\mathbf{d}_r - \mathbf{y}_r) \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{y}_r) \cdot (\mathbf{1} + \mathbf{y}_r) \quad (9)$$

とする。ここでは、“ \cdot ”の記号によって四元数の要素ごとの乗算を表すことにする。また、 \mathbf{v}_q および \mathbf{x}_p は、それぞれ q 番目中間素子からの出力および、 p 番目入力を表す。さらに、 $\mathbf{1}$ は各要素が1の四元数とするこれらの荷重修正量に基づいて、

$$\mathbf{w}^{new} = \mathbf{w}^{old} - \varepsilon_t \Delta \mathbf{w}, \quad (10)$$

の式に基づき入力を更新する。ここで ε_e は入力更新の係数、 \mathbf{w} は \mathbf{w}_{qr} または \mathbf{w}_{pq} を意味する。この手順を繰り返すことで四元数入出力間の関係を学習できる⁹⁾。

3 逆問題と四元数ニューラルネット

逆問題とは観測された現象から原因やその現象を起こす内部機構を推定する問題である。順問題が原因から結果を導くのに対し、逆問題は結果から原因を求める、または出力から入力を求めるものを指す。

多層型ニューラルネットを用いて逆問題を解く方法としてインバージョン法がある。通常が多層型ニューラルネットでは、入力から出力への方で学習を行い、学習した関係を用いて入力から出力を推定する。これに対しインバージョンでは、通常通り学習した関係を逆に使い、勾配法に基づき、

$$\mathbf{x}^{new} = \mathbf{x}^{old} - \varepsilon_e \frac{\partial E}{\partial \mathbf{x}} \quad (11)$$

として入力を繰り返し修正することで、与えられた出力に対応する入力を求めることができ、逆問題を解くことができる。ここで E, \mathbf{x} および ε_e はそれぞれ出力誤差、入力および入力修正のための微小係数である。

3.1 四元数ネットワークインバージョン

本研究では、学習済みの多層型四元数ニューラルネットを用いて逆問題を解くための四元数インバージョンを考える。この方法では、学習済み多層型四元数ニ

ューラルネットを用いて、与えられた四元数出力に対応する四元数入力を推定する。

逆推定時は、学習時に得られた荷重を固定したまま初期入力を与え、得られた出力から出力誤差関数を求める。出力誤差関数は四元数出力各部の2乗誤差とし、

$$E = \frac{1}{2} \sum_r \|\mathbf{d}_r - \mathbf{y}_r\|^2 \quad (12)$$

とする。 \mathbf{d}_r および \mathbf{y}_r は、それぞれ r 番目素子に与えられた出力とネットワーク出力である。 r 番目出力素子からの誤差信号 δ_r および、 q 番目中間素子からの誤差信号 δ_q はそれぞれ、

$$\begin{aligned} \delta_r &= (\mathbf{d}_r - \mathbf{y}_r) \cdot (\mathbf{1} - \mathbf{y}_r) \cdot (\mathbf{1} + \mathbf{y}_r), \\ \delta_q &= (\mathbf{1} - \mathbf{v}_q) \cdot (\mathbf{1} + \mathbf{v}_q) \cdot \sum_r \delta_r \cdot \overline{\mathbf{w}_{qr}}, \end{aligned} \quad (13)$$

となる。 \mathbf{v}_q および \mathbf{w}_{qr} は、それぞれ q 番目中間素子からの出力および、 q 番目中間素子から r 番目出力素子への荷重を表す。これらの誤差信号による p 番目入力素子の入力の修正量 δ_p は、

$$\delta_p = \sum_q \delta_q \cdot \overline{\mathbf{w}_{pq}}, \quad (14)$$

と書ける。ここで \mathbf{w}_{pq} は、 p 番目入力素子から q 番目中間素子への荷重を表す。この修正量に基づいて、

$$\mathbf{x}_p^{new} = \mathbf{x}_p^{old} - \varepsilon_e \delta_p, \quad (15)$$

によって入力を更新する。ここで ε_e は入力更新の係数を意味する。この手順を繰り返すことで、学習によって得られた四元数荷重分布を使用して、四元数出力から四元数入力を繰り返し法によって逆推定できる⁹⁾。

4 ロボットアーム逆運動学問題

Fig.1に示す3自由度ロボットアームを対象とする。まず順運動学問題を考える。ロボットアームは3つのリンク l_1, l_2, l_3 から成るものとし、初期値を $\hat{l}_1 = [0, 0, l_1]^T$, $\hat{l}_2 = [0, 0, l_2]^T$, $\hat{l}_3 = [0, 0, l_3]^T$ とする。 $S_1 = \sin \theta_1, C_1 = \cos \theta_1, S_2 = \sin \theta_2, C_2 = \cos \theta_2, S_3 = \sin \theta_3, C_3 = \cos \theta_3$ とすると、リンク l_1, l_2, l_3 の回転行列 R_1, R_2, R_3 は

$$\begin{aligned} R_1 &= \begin{bmatrix} C_1 & -S_1 & 0 \\ S_1 & C_1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad R_2 = \begin{bmatrix} C_2 & 0 & S_2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -S_2 & 0 & C_2 \end{bmatrix}, \\ R_3 &= \begin{bmatrix} C_3 & 0 & S_3 \\ 0 & 1 & 0 \\ -S_3 & 0 & C_3 \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (16)$$

と表現され、 $l_1 = R_1 \hat{l}_1, l_2 = R_1 R_2 \hat{l}_2, l_3 = R_1 R_2 R_3 \hat{l}_3$ より、先端座標 P は

$$P = l_1 + l_2 + l_3 = \begin{bmatrix} l_2 C_1 S_2 + l_3 C_1 S_{23} \\ l_2 S_1 S_2 + l_3 S_1 S_{23} \\ l_1 + l_2 C_2 + l_3 C_{23} \end{bmatrix}, \quad (17)$$

となる。ただし $S_{23} = \sin(\theta_2 + \theta_3), C_{23} = \cos(\theta_2 + \theta_3)$ とする¹⁰⁾。

本研究では、 $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ を与えそれに対する先端座標 $P(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ を計算して学習データとする。実際には、回転行列 R_1, R_2, R_3 に対応する四元数 q_1, q_2, q_3 と、先端座標に対応する四元数 p を用いる。基本的な動作を確認するために、 $\theta_1 = \{0^\circ, 30^\circ, 60^\circ, 90^\circ\}, \theta_2 = \theta_3 = \{30^\circ, 60^\circ\}$ とし、この関節角に対する先端座標 $P(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ を求め学習データとした。

学習済みの四元数ニューラルネットに対し、目標となる先端座標を与え、インバージョンにより関節角の推定を行うことで逆運動学問題を解く。

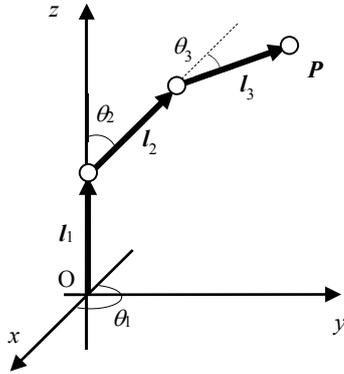


Fig.1 3DOF robot arm.

5 実験

四元数ニューラルネットによるロボットアーム逆運動学解法の動作を示すために、上記の関節角—先端座標のデータを用いて、ネットワークの学習により3自由度アームの逆運動学問題を解く。ネットワークのパラメータはTable 1の通りである。入力には θ_1 と $\theta_2 (= \theta_3)$ の2つの関節角に対応する四元数、出力は1つの先端座標を表す四元数とした。

5.1 学習の確認

学習データを与えた場合の収束性を確認する。学習係数をTable 1の通り設定すると学習誤差は学習の上限回数までの間に十分に減少した。学習係数を変更して学習した場合を含めてFig. 2に誤差曲線を示す。学習係数を0.1とした場合は誤差が減少しなかったが、それ以下の場合はいずれも減少した。

続いて、学習済みネットワークを用いて、入力に学習データと同じ関節角を与え、出力として先端座標が得られることを確認する。これは四元数ニューラルネットを用いた順運動学解法に相当する。Fig. 3は8組のデータを与えたときに推定された先端座標の各成分を表す。正解値および推定値の成分をそれぞれ $(x_1, x_2, x_3), (x_1', x_2', x_3')$ とする。結果より、与えたデータに対して先端座標が正しく推定されている。

学習誤差の推移および順問題解法により、関節角と先端座標の四元数間の関係が正しく学習されていることがわかる。

5.2 関節角の逆推定

学習済みのネットワークを用いて逆運動学の解法を試みる。推定に用いるデータは、学習に用いたデータと同じものを用いる。先端座標を表すそれぞれのデー

タの出力値を与え、対応する関節角を推定する。8組のデータに対する繰り返し修正による誤差の推移をFig. 4に示す。これによると、一部のデータで修正が進行しないケースがあるが、多くのデータで入力の修正によって誤差が減少していく様子が見られる。

続いて、Fig. 5に推定結果の関節角の四元数の各部の値を示す。Fig. 5(a)が関節 θ_1 、(b)が関節 θ_2 である。正解値および推定値の成分を $(x_1, x_2, x_3), (x_1', x_2', x_3')$ とする。ただし、値がすべて0の要素は除いてある。これによると誤差はあるものの関節角を表す四元数が推定されていることがわかる。

入力修正の際に誤差の減少および関節角の推定結果により、関節角の逆推定の傾向が確認できる。

5.3 考察

学習の実験において、四元数に拡張された誤差逆伝搬学習によって、出力誤差の減少と収束が確認された。これにより、多層型の四元数ニューラルネットにより、3自由度ロボットアームの順運動学の学習が可能であることを確認した。また、学習と推定で同一のデータを用いて関節角から先端座標を求める順運動学の解法を確認することで、学習が正しく行われたことを確認した。以上より、多層型四元数ニューラルネットが四元数で表現されたロボットアームの関節角と先端座標の関係を学習するのに有効であることを確認した。

逆推定の実験において、四元数に拡張されたインバージョン法により、提示された出力に対応する入力の繰り返し修正を確認した。これは、繰り返し修正の間の誤差の減少と、推定された関節角の四元数により確認できる。ただし、学習と順運動学の解法では誤差が小さく安定した順推定が行われているのに対し、インバージョンによる逆推定では、データによっては誤差が大きく、不安定な様子が見られた。インバージョンによる逆推定の傾向を確認したが、順運動学の場合と違ってばらつきが大きく、精密かつ安定的な逆推定のためには何らかの対策が必要である。

Table 1 Network parameters

Network	QNN
Number of input neurons	2
Number of hidden neurons	10
Number of output neurons	1
Learning rate ϵ_l	0.001
Input update rate ϵ_e	0.0001
Max. number of training epoch	20000
Max. number of estimating epoch	10000

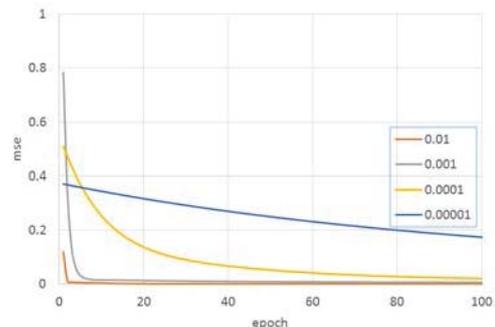


Fig.2 Training errors for each learning rate.

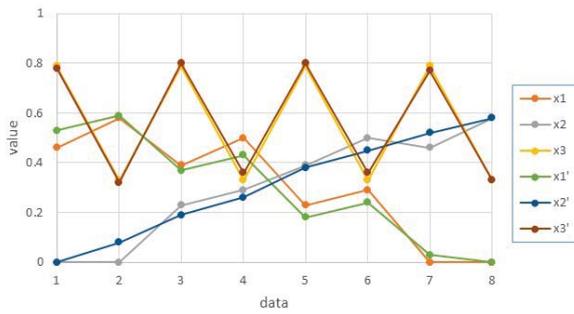


Fig. 3 Estimated output of end effector coordinate.

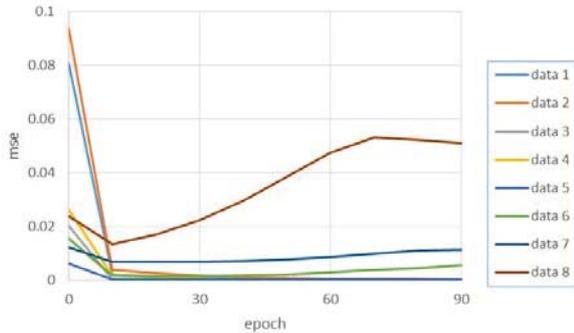


Fig. 4: Estimation error for each test data.

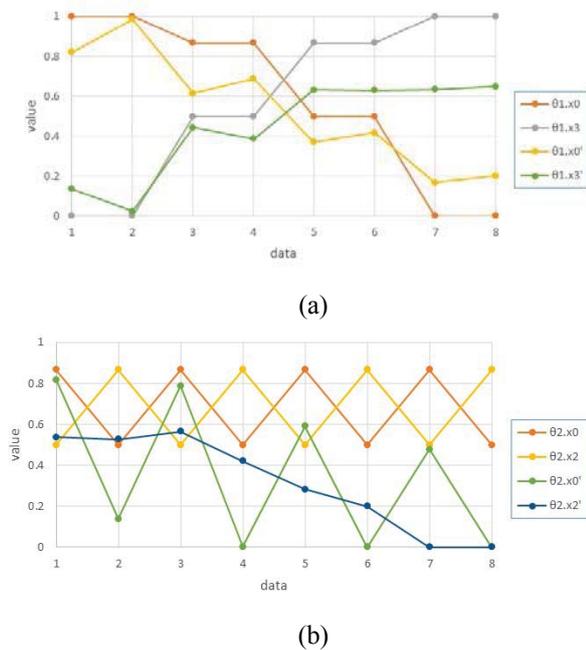


Fig. 5: Estimated angles of each test data, (a) joint angle θ_1 and (b) θ_2 .

6 まとめ

本研究では、四元数ニューラルネット上で逆問題を解くための四元数インバージョン法をロボットアーム逆運動学問題に応用することを検討した。3自由度アームを対象に、関節角と先端座標を四元数で表現したデータを作成し、計算機実験を行った。学習は正しく行われることが示され、多層型四元数ニューラルネットが四元数で表現されたロボットアームの関節角と先端座標の関係を学習するのに有効であることを確認した。一方逆推定ではやや誤差が見られるものの、インバージョンによる解法の動作を確認した。逆運動学解法の精度向上のためには、さらに検討が必要である。

今後の課題として、四元数の特徴である線形補間の効果の検証やネットワークの汎化能力の確認、不良設定問題への対処、さらにロボットアーム実機を用いた検証などを予定している。

謝辞

本研究の一部は科学研究費補助金（基盤 C，課題番号 26330284）の援助を受けた。

参考文献

- 1) T. Nitta, "An extension of the back-propagation algorithm to quaternions", Proc. of Int'l Conf. on Neural Information Processing, 1, 247/250 (1996)
- 2) N. Matsui, T. Isokawa, H. Kusamichi, F. Peper and H. Nishimura, "Quaternion neural network with geometrical operators", Journal of Intelligent and Fuzzy Systems, Vol. 15, No. 3-4, 149/164 (2004)
- 3) F. D. M. Neto and A. J. Neto, "An introduction to inverse problems with applications", Springer (2011)
- 4) A. Linden and J. Kindermann, "Inversion of multilayer nets," in Proc. Int. Joint Conf. on Neural Networks, 425/430 (1989)
- 5) T. Iura and T. Ogawa, "Quaternion Network Inversion for Solving Inverse Problems", Proc. of the SICE Annual Conf. 2012, 1802/1805 (2012)
- 6) 広瀬茂男, ロボット工学, 裳華房 (1987)
- 7) T. Ogawa and H. Kanada, "Solution for Ill-posed Inverse Kinematics of Robot Arm by Network Inversion", Journal of Robotics, Article ID 870923 (2010)
- 8) F. Dunn, I. Parverry, 松田晃一訳, 実例で学ぶゲーム 3D 数学, オライリージャパン (2008).
- 9) 井浦翼, 小川毅彦, 「四元数ネットワークインバージョンのための正則化」第 4 回コンピューターショナル・インテリジェンス研究会講演論文集 (2013)
- 10) 出村公成, 簡単実践ロボットシミュレーション, 森北出版 (2007)

2次元スプライン平滑化に基づく代数的連続位相復元法

○北原 大地 山田 功 (東京工業大学)

Algebraic Phase Unwrapping Based on Two-Dimensional Spline Smoothing

*D. Kitahara and I. Yamada (Tokyo Institute of Technology)

Abstract– In this report, we introduce the main ideas of our approach [Kitahara and Yamada, IEEE Transactions on Signal Processing, (accepted for publication)] for high-resolution 2D phase unwrapping. In the first step (SPS: Spline Smoothing), we construct a pair of the smoothest spline functions which minimize the energies of their local changes while interpolating respectively the cosine and the sine of given wrapped phase. If these functions have no common zero over the domain of our interest, the proposed estimate of the unwrapped phase can be obtained by algebraic phase unwrapping in the second step (APU: Algebraic Phase Unwrapping) as a continuous function. The smoothness of the proposed unwrapped phase function is guaranteed globally over the domain without losing any consistency with the wrapped phase. Numerical experiments for terrain height estimation demonstrate the effectiveness of the proposed method.

Key Words: Two-dimensional phase unwrapping, Algebraic phase unwrapping, Bivariate Spline smoothing, Convex optimization, Interferometric synthetic aperture radar, Terrain height estimation.

1 Introduction

Two-dimensional (2D) phase unwrapping^{1), 2)} is an estimation problem of an unknown continuous phase function $\Theta : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ from its noisy wrapped samples

$$\Theta^W(x, y) := W(\Theta(x, y) + \nu(x, y)) \in (-\pi, \pi] \quad (1)$$

observed at $(x, y) \in \mathcal{G} \subset \Omega$, where $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ is a simply connected closed region, \mathcal{G} is the set of finite sampling points, ν is additive phase noise, and $W : \mathbb{R} \rightarrow (-\pi, \pi]$ is the *wrapping operator* defined by

$$\forall \vartheta \in \mathbb{R} \exists \eta \in \mathbb{Z} \quad \vartheta = W(\vartheta) + 2\pi\eta \text{ and } W(\vartheta) \in (-\pi, \pi].$$

Θ and Θ^W are respectively called the *unwrapped phase* and the *wrapped phase*. 2D phase unwrapping is important for signal and image processing applications such as *terrain height estimation* and *landslide identification* by interferometric synthetic aperture radar (InSAR)^{3)–10)}, *seafloor depth estimation* by interferometric synthetic aperture sonar (InSAS)^{11)–14)}, *3D shape measurement* by fringe projection^{15)–18)} or X-ray^{19)–22)}, and *water/fat separation* in magnetic resonance imaging (MRI)^{23)–26)}.

As remarked clearly in [27], all commonly used phase unwrapping algorithms are based on the assumption that the true unwrapped phase field varies slowly enough that in most places, neighboring phase values are within one-half cycle (π rad) of one another, i.e., it is assumed that $\Delta\Theta_i := \Theta(\tilde{x}, \tilde{y}) - \Theta(x, y) \in (-\pi, \pi]$ for most neighboring pairs of samples $i := ((x, y), (\tilde{x}, \tilde{y})) \in \mathcal{G} \times \mathcal{G}$. Such algorithms have been designed to suppress a certain function J measuring the unwrapped phase differences $\Delta\Theta_i$ for all neighboring pairs $i \in \mathcal{G} \times \mathcal{G}$ as

$$J(\Theta) := \sum_i w_i |\Delta\Theta_i - W(\Delta\Theta_i^W)|^p,$$

where $w_i > 0$, $p > 0$, $\Theta := \text{vec}(\Theta(x, y))_{(x, y) \in \mathcal{G}}$ stands for the vectorization of $\Theta(x, y)$ on \mathcal{G} , and $\Delta\Theta_i^W := \Theta^W(\tilde{x}, \tilde{y}) - \Theta^W(x, y)$ is the wrapped phase difference between a neighboring pair of samples $i = ((x, y), (\tilde{x}, \tilde{y}))$.

For example, branch cut (BC) algorithm⁵⁾ and minimum spanning tree (MST) algorithm²⁷⁾ employ $p \rightarrow +0$, minimum cost flow (MCF) algorithm²⁸⁾ employs $p = 1$, and least squares (LS) algorithm²⁹⁾ employs $p = 2$. Such a specification of J is introduced on the basis of a simple property that, under the assumption $\nu = 0$,

$$\Delta\Theta_i = W(\Delta\Theta_i^W) \Leftrightarrow \Delta\Theta_i \in (-\pi, \pi].$$

Then the algorithms try to use a minimizer of J as an estimate of the unwrapped phase.

BC, MST and MCF algorithms assume that noise ν in (1) is small enough and try to find a minimizer of J under the condition

$$\forall (x, y) \in \mathcal{G} \quad W(\Theta(x, y)) = \Theta^W(x, y) \quad (2)$$

This type of optimization problem is combinatorial and intractable due to condition (2). In order to solve this problem, these algorithms use an elegant technique developed originally for network flow in graph theory^{2), 27)}. In this approach, if the observed wrapped phase has only small noise and the unwrapped phase difference is sufficiently small with respect to sampling interval, we can construct a very good estimate. However, otherwise, condition (2) is violated due to noise ν in (1), and the minimizer of J is hard to compute due to condition (2).

LS algorithm directly computes a minimizer Θ^* of J without requiring condition (2). In this approach, even if the observed wrapped phase is noisy, Θ^* can be obtained. However the consistency between Θ^* and Θ^W , i.e., $W(\Theta^*(x, y)) \approx \Theta^W(x, y)$ is not guaranteed at many sampling points $(x, y) \in \mathcal{G}$.

In this paper, we propose a completely different algebraic approach to 2D phase unwrapping by exploiting the property of $\Theta^W \in (-\pi, \pi]$:

$$\begin{aligned} \Theta^W &= W(\Theta + \nu) \\ &\Leftrightarrow (\cos \Theta^W, \sin \Theta^W) = (\cos(\Theta + \nu), \sin(\Theta + \nu)). \end{aligned} \quad (3)$$

The proposed scheme achieves a high-resolution estimate of the unwrapped phase Θ unlike many existing algorithms^{5), 10), 25)–29)}. We estimate Θ as the continuous phase function $\theta_f \in C^2(\Omega)$ of a twice continuously differentiable complex function $f := f_{(0)} + \iota f_{(1)} = |f|e^{i\theta_f}$, where $f_{(0)} \in C^2(\Omega)$ and $f_{(1)} \in C^2(\Omega)$ have no common zero over Ω (see Notation in the end of this section). Then the estimation problem of Θ is replaced with those of $f_{(0)}$ and $f_{(1)}$ which respectively approximate $\cos \Theta$ and $\sin \Theta$. Clearly, by (3), $f_{(0)}$ and $f_{(1)}$ are desired to interpolate respectively $\cos(\Theta^W(x, y)) = \cos(\Theta(x, y))$ and $\sin(\Theta^W(x, y)) = \sin(\Theta(x, y))$ if $\nu(x, y) = 0$ at $(x, y) \in \mathcal{G}$. Motivated by the main idea of *functional data analysis*^{30)–32)}, we assume that f is “smooth” which means that the energy of local change is small over Ω , and adopt the *bivariate spline space* as the set of all candidates of $f_{(0)}$ and $f_{(1)}$. After finding the smoothest spline functions $f_{(0)}^*$ and $f_{(1)}^*$ which are consistent with the wrapped phase information $\cos(\Theta^W(x, y))$ and $\sin(\Theta^W(x, y))$ at $(x, y) \in \mathcal{G}$ (*Spline Smoothing (SPS)*), the continuous phase function θ_{f^*} of $f^* := f_{(0)}^* + \iota f_{(1)}^* = |f^*|e^{i\theta_{f^*}}$ is analytically computed, as the proposed estimate of Θ , by *Algebraic Phase Unwrapping (APU)*^{33)–37)}. This approach is particularly effective in the case where phase noise ν is relatively small and f^* has no zero over Ω . Indeed, by this approach, we can maximize a certain smoothness of θ_f subject to the condition $W(\theta_f(x, y)) \approx \Theta^W(x, y)$ for all sampling points $(x, y) \in \mathcal{G}$ unlike other algorithms. Numerical experiments for InSAR terrain height estimation demonstrates the effectiveness of the proposed scheme.

Notation Let $\mathbb{Z}, \mathbb{Z}_+, \mathbb{R}, \mathbb{R}_+$ and \mathbb{C} be the set of all integers, non-negative integers, real numbers, non-negative real numbers, and complex numbers, respectively. We use $\iota \in \mathbb{C}$ to denote the imaginary unit, i.e., $\iota^2 = -1$, and use $i, j \in \mathbb{Z}_+$ for general indices. For any set S , $\text{card}(S)$ stands for its cardinal number. For $\rho \in \mathbb{Z}_+$, $C^\rho(\Omega)$ stands for the set of all ρ -times continuously differentiable real-valued functions over a simply connected region $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. A boldface letter expresses a vector or a matrix.

2 Preliminaries—Bivariate Spline Functions

We restrict ourselves to partitioning a polygonal domain $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ into triangles because these have the most flexibility with respect to the resolution of discretization in Ω .

Define a triangle $\mathcal{T} \subset \mathbb{R}^2$, by specifying three vertices $\mathbf{v}_k := (x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2$ ($k = 1, 2, 3$) which are not arranged linearly, i.e., $\varrho := x_1y_2 - y_1x_2 + x_2y_3 - y_2x_3 + x_3y_1 - y_3x_1 \neq 0$, as

$$\begin{aligned} \mathcal{T} &:= \langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3 \rangle \\ &:= \left\{ r\mathbf{v}_1 + s\mathbf{v}_2 + t\mathbf{v}_3 \in \mathbb{R}^2 \left| \begin{array}{l} r, s, t \in [0, 1] \\ r + s + t = 1 \end{array} \right. \right\}. \end{aligned}$$

Let $\Delta := \{\mathcal{T}_i\}_{i=1}^N$ be a collection of triangles $\mathcal{T}_i \subset \mathbb{R}^2$ whose union forms a simply connected closed region $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, i.e., $\bigcup_{i=1}^N \mathcal{T}_i = \Omega$. If, for any pair of triangles $\mathcal{T}_i \in \Delta$ and $\mathcal{T}_j \in \Delta$ ($i \neq j$), $\mathcal{T}_i \cap \mathcal{T}_j$ is either empty or a common edge or a common vertex, the collection Δ is called a

regular triangulation. Given a regular triangulation Δ and $\rho, d \in \mathbb{Z}_+$ s.t. $0 \leq \rho < d$, define

$$\mathcal{S}_d^\rho(\Delta) := \{f \in C^\rho(\Omega) \mid \forall \mathcal{T}_i \in \Delta \quad f = f_i \in \mathbb{P}_d \text{ over } \mathcal{T}_i\}$$

as the set of all bivariate spline functions of degree d and smoothness ρ on Δ , where \mathbb{P}_d stands for the set of all bivariate polynomials whose degree is d at most, i.e., $\mathbb{P}_d := \{f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} : (x, y) \mapsto \sum_{i=0}^d \sum_{j=0}^{d-i} c_{i,j} x^i y^j \mid c_{i,j} \in \mathbb{R}\}$.

For $\mathcal{T} = \langle \mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3 \rangle$ s.t. $\mathbf{v}_k = (x_k, y_k) \in \mathbb{R}^2$ ($k = 1, 2, 3$), every $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ can be expressed in the form

$$(x, y) = r\mathbf{v}_1 + s\mathbf{v}_2 + t\mathbf{v}_3 \quad \text{s.t. } r + s + t = 1,$$

where (r, s, t) is called *barycentric coordinate*^{38), 39)} of (x, y) with respect to \mathcal{T} and expressed as

$$\left. \begin{aligned} r &= ((y_2 - y_3)x - (x_2 - x_3)y + x_2y_3 - y_2x_3)/\varrho \\ s &= ((y_3 - y_1)x - (x_3 - x_1)y + x_3y_1 - y_3x_1)/\varrho \\ t &= ((y_1 - y_2)x - (x_1 - x_2)y + x_1y_2 - y_1x_2)/\varrho \end{aligned} \right\}.$$

By using the above expression of (x, y) , the *Bernstein-Bézier polynomial* of degree d is defined, for \mathcal{T} and $(l, m, n) \in \mathbb{Z}_+^3$ satisfying $l + m + n = d$, as

$$B_{l,m,n}^{\mathcal{T}} : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R} : (x, y) \mapsto \frac{d!}{l!m!n!} r^l s^m t^n.$$

It is known that $\{B_{l,m,n}^{\mathcal{T}} \mid l, m, n \in \mathbb{Z}_+ \text{ and } l+m+n = d\}$ is a basis of \mathbb{P}_d , and hence any piecewise polynomial f , whose restriction f_i to $\mathcal{T}_i \in \Delta$ satisfies $f_i \in \mathbb{P}_d$ ($i = 1, 2, \dots, N$), can be expressed uniquely as

$$f_i(x, y) = \sum_{l+m+n=d} c_{l,m,n}^{\mathcal{T}_i} \frac{d!}{l!m!n!} r^l s^m t^n,$$

where (r, s, t) is barycentric coordinate with respect to \mathcal{T}_i . Such a representation of piecewise polynomials is called the *Bernstein-Bézier form*, and $c_{l,m,n}^{\mathcal{T}_i} \in \mathbb{R}$ is called the *Bernstein-Bézier coefficient* (or *B-coefficient*). We define the B-coefficient vector as $\mathbf{c} := \text{vec}(c_{l,m,n}^{\mathcal{T}_i})_{l+m+n=d}^{i=1,2,\dots,N}$.

3 Algebraic Recovery of Unwrapped Phase

3.1 General Idea of The Proposed Scheme

In this section, we propose an algebraic approach for high-resolution 2D phase unwrapping. We estimate the unwrapped phase Θ as a continuous function defined over Ω unlike many existing algorithms. In our previous works^{36), 37)}, by using *Poincaré’s lemma*⁴⁰⁾, we clarified the condition for the unique existence of the continuous phase function $\theta_f \in C^2(\Omega)$ of a complex function $f := f_{(0)} + \iota f_{(1)} : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ s.t. $f_{(k)} \in C^2(\Omega)$ ($k = 0, 1$).

Fact 1 ([36]) *Let Ω be a simply connected closed region on \mathbb{R}^2 . Suppose that $f_{(k)} : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ($k = 0, 1$) are twice continuously differentiable functions, i.e., $f_{(k)} \in C^2(\Omega)$, and satisfy $f(x, y) := f_{(0)}(x, y) + \iota f_{(1)}(x, y) \neq 0$ for all $(x, y) \in \Omega$. Then for arbitrarily fixed $(x_0, y_0) \in \Omega$ and θ_0 satisfying $f(x_0, y_0) = |f(x_0, y_0)|e^{i\theta_0}$, the following hold.*

(i) There exists a unique continuous function $\theta_f \in C^2(\Omega)$ satisfying $\theta_f(x_0, y_0) = \theta_0$ and

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \theta_f}{\partial x}(x, y) &= \Im \left[\frac{\frac{\partial f_{(0)}}{\partial x}(x, y) + \iota \frac{\partial f_{(1)}}{\partial x}(x, y)}{f_{(0)}(x, y) + \iota f_{(1)}(x, y)} \right] \\ \frac{\partial \theta_f}{\partial y}(x, y) &= \Im \left[\frac{\frac{\partial f_{(0)}}{\partial y}(x, y) + \iota \frac{\partial f_{(1)}}{\partial y}(x, y)}{f_{(0)}(x, y) + \iota f_{(1)}(x, y)} \right] \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

for all $(x, y) \in \Omega$, where $\Im(c)$ stands for the imaginary part of $c \in \mathbb{C}$. θ_f satisfies

$$f(x, y) = |f(x, y)| e^{i\theta_f(x, y)} \quad \text{for all } (x, y) \in \Omega.$$

(ii) Let $\Upsilon : [a, b] \rightarrow \Omega$ be a piecewise C^1 path s.t. $\Upsilon(a) = (x_0, y_0)$ and $\Upsilon(b) = (x_1, y_1) \in \Omega$. Then we have

$$\theta_f(x_1, y_1) = \theta_0 + \int_a^b \Im \left[\frac{F'_{(0)}(\tau) + \iota F'_{(1)}(\tau)}{F_{(0)}(\tau) + \iota F_{(1)}(\tau)} \right] d\tau,$$

where $F_{(k)}(\tau) := f_{(k)}(\Upsilon(\tau))$ ($k = 0, 1$). \square

Remark 1 (Note on Equation (4)) Note that

$$\left. \begin{aligned} \Im \left[\frac{\frac{\partial f_{(0)}}{\partial x}(x, y) + \iota \frac{\partial f_{(1)}}{\partial x}(x, y)}{f_{(0)}(x, y) + \iota f_{(1)}(x, y)} \right] &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\arctan \left(\frac{f_{(1)}(x, y)}{f_{(0)}(x, y)} \right) \right] \\ \Im \left[\frac{\frac{\partial f_{(0)}}{\partial y}(x, y) + \iota \frac{\partial f_{(1)}}{\partial y}(x, y)}{f_{(0)}(x, y) + \iota f_{(1)}(x, y)} \right] &= \frac{\partial}{\partial y} \left[\arctan \left(\frac{f_{(1)}(x, y)}{f_{(0)}(x, y)} \right) \right] \end{aligned} \right\}$$

holds at every $(x, y) \in \Omega$ satisfying $f_{(0)}(x, y) \neq 0$, where $\arctan(x) \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$ denotes the principle value of the inverse tangent for all $x \in \mathbb{R}$, i.e., $\tan(\arctan(x)) = x$. \square

Trying to estimate Θ by $\theta_f \in C^2(\Omega)$, from Fact 1, we can reduce the estimation problem of Θ to those of $f_{(0)} \in C^2(\Omega)$ and $f_{(1)} \in C^2(\Omega)$ which respectively approximate $\cos \Theta$ and $\sin \Theta$. In particular, under the assumption that phase noise ν is not significant in (1), $f_{(0)}$ and $f_{(1)}$ are desired to interpolate $\cos(\Theta^W(x, y)) \approx \cos(\Theta(x, y))$ and $\sin(\Theta^W(x, y)) \approx \sin(\Theta(x, y))$, respectively, at every sampling point $(x, y) \in \mathcal{G}$. Moreover, on the basis of the idea of *functional data analysis*^{30)–32)}, we search for $f_{(0)}$ and $f_{(1)}$ which are smooth. Here the word ‘‘smooth’’ means that the energy of local change, i.e., the ℓ_2 norm of the second order partial derivative, is small over Ω . Therefore we design a smooth continuous phase function θ_f , by minimizing the energy of local change of $f_{(k)}$ ($k = 0, 1$):

$$\iint_{\Omega} \left[\left| \frac{\partial^2 f_{(k)}}{\partial x^2} \right|^2 + 2 \left| \frac{\partial^2 f_{(k)}}{\partial x \partial y} \right|^2 + \left| \frac{\partial^2 f_{(k)}}{\partial y^2} \right|^2 \right] dx dy \quad (5)$$

in a suitable functional space subject to $|f(x, y)| > 0$ for all $(x, y) \in \Omega$ and¹

$$\left. \begin{aligned} f_{(0)}(x, y) &= \cos(\Theta^W(x, y)) \\ f_{(1)}(x, y) &= \sin(\Theta^W(x, y)) \end{aligned} \right\} \quad \text{for all } (x, y) \in \mathcal{G}. \quad (6)$$

¹Of course, condition (6) can be generalized in a natural way if amplitude information at every sampling point $(x, y) \in \mathcal{G}$ is available.

We can guarantee $W(\theta_f(x, y)) = \Theta^W(x, y)$ for all sampling points $(x, y) \in \mathcal{G}$ if (6) and $|f(x, y)| > 0$ for all $(x, y) \in \Omega$. Motivated by Fact 1 and the successful utilization of spline functions in functional data analysis^{41)–46)}, we adopt the bivariate spline space $\mathcal{S}_d^2(\Delta)$ ($d \geq 3$) as the set of all possible candidates of $f_{(k)}$.

As a result, we propose the following 2D phase unwrapping scheme whose core consists of *SPLine Smoothing (SPS)* and *Algebraic Phase Unwrapping (APU)*.

SPS: Find $f_{(k)}^* \in \mathcal{S}_d^2(\Delta) \subset C^2(\Omega)$ ($k = 0, 1$ and $d \geq 3$) which minimize (5) subject to (6).

APU: For any point of interest $(x, y) \in \Omega$, compute the value of $\theta_{f^*}(x, y)$ defined in Fact 1(ii) along a suitable piecewise C^1 path Υ .

Note that SPS is a convex relaxation of an original optimization problem, defined with (5) and (6), which requires an additional condition $f_{(0)}(x, y) + \iota f_{(1)}(x, y) \neq 0$ for all $(x, y) \in \Omega$. Fortunately, if the observed wrapped phase Θ^W is not contaminated by severe phase noise and sufficiently many sampling points are available to capture the geometric feature of Θ , the solution $(f_{(0)}^*, f_{(1)}^*)$ of this relaxed problem tends to automatically satisfy the additional condition. If there exists some $(x, y) \in \Omega$ s.t. $f_{(0)}^*(x, y) + \iota f_{(1)}^*(x, y) = 0$, we use a denoising step proposed in Section 3.4 to avoid the occurrence of zeros.

3.2 SPLine Smoothing (SPS)

Let $\mathbf{c}_{(k)}$ ($k = 0, 1$) be the B-coefficient vectors of $f_{(k)} \in \mathcal{S}_d^2(\Delta)$ (see Section 2). Then the energy of local change in (5) can be expressed as $\mathbf{c}_{(k)}^T \mathbf{Q} \mathbf{c}_{(k)}$, where \mathbf{Q} is a symmetric positive semidefinite matrix⁴⁷⁾. The condition $f_{(k)} \in \mathcal{S}_d^2(\Delta)$ is equivalent to $\mathbf{H} \mathbf{c}_{(k)} = \mathbf{0}$ and condition (6) can be expressed as $\mathcal{I} \mathbf{c}_{(k)} = \mathbf{d}_{(k)}$ in terms of

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{d}_{(0)} &:= \text{vec}(\cos(\Theta^W(x, y)))_{(x, y) \in \mathcal{G}} \\ \mathbf{d}_{(1)} &:= \text{vec}(\sin(\Theta^W(x, y)))_{(x, y) \in \mathcal{G}} \end{aligned} \right\}$$

and a sparse matrix \mathcal{I} ⁴⁶⁾. Indeed, if we assume that

$$\text{every } (x, y) \in \mathcal{G} \text{ is a vertex of some } \mathcal{T} \in \Delta, \quad (7)$$

each row vector of \mathcal{I} has only one non-zero component ‘1’. As a result, SPS in the proposed scheme is reduced to the following convex optimization problem, say SPS again, for the B-coefficient vector $\mathbf{c}_{(k)}$:

SPS: Find $\mathbf{c}_{(k)}^*$ ($k = 0, 1$) minimizing

$$\begin{aligned} &\mathbf{c}_{(k)}^T \mathbf{Q} \mathbf{c}_{(k)} \\ &\text{subject to } \mathbf{H} \mathbf{c}_{(k)} = \mathbf{0} \text{ and } \mathcal{I} \mathbf{c}_{(k)} = \mathbf{d}_{(k)}. \end{aligned}$$

Moreover, by considering the influence of phase noise ν , we can relax SPS as a generalized Hermite-Birkhoff interpolation problem⁴⁴⁾:

SPS+: Find $\mathbf{c}_{(k)}^*$ ($k = 0, 1$) minimizing

$$\begin{aligned} &\mathbf{c}_{(k)}^T \mathbf{Q} \mathbf{c}_{(k)} \\ &\text{subject to } \mathbf{H} \mathbf{c}_{(k)} = \mathbf{0} \text{ and } -\epsilon_{(k)} \leq \mathcal{I} \mathbf{c}_{(k)} - \mathbf{d}_{(k)} \leq \epsilon_{(k)}, \end{aligned}$$

where $\epsilon_{(k)} := \text{vec}(\epsilon_{(k)}(x, y))_{(x, y) \in \mathcal{G}} \in \mathbb{R}_+^{\text{card}(\mathcal{G})}$ ($k = 0, 1$) are the acceptable interpolation errors designed to be small if the wrapped phase $\Theta^W(x, y)$ is reliable at $(x, y) \in \mathcal{G}$, and relatively large otherwise. SPS and SPS+ can be solved by quadratic programming solvers^{(48)–(50)}, if the constraints are feasible.

Even if the constraint in SPS (or SPS+) is infeasible, it can be relaxed in the following sense of hierarchical convex optimization problem:

SPS++: Find $\mathbf{c}_{(k)}^{**}$ ($k = 0, 1$) minimizing

$$\begin{aligned} & \mathbf{c}_{(k)}^{*T} \mathbf{Q} \mathbf{c}_{(k)}^* \\ \text{subject to } & \mathbf{c}_{(k)}^* \in \underset{\mathbf{H} \mathbf{c}_{(k)} = \mathbf{0}}{\text{argmin}} \|\mathbf{I} \mathbf{c}_{(k)} - \mathbf{d}_{(k)}\|_2^2. \end{aligned}$$

SPS++ is solved by *hybrid steepest descent method*^{(51)–(56)}.

3.3 Algebraic Phase Unwrapping (APU)

Let $\Delta := \{\mathcal{T}_i := \langle \mathbf{v}_1^{(i)}, \mathbf{v}_2^{(i)}, \mathbf{v}_3^{(i)} \rangle\}_{i=1}^N$ be a regular triangulation satisfying (7), and let $\theta_0 \in \mathbb{R}$ satisfy $f^*(\mathbf{v}_1^{(1)}) := f_{(0)}^*(\mathbf{v}_1^{(1)}) + \imath f_{(1)}^*(\mathbf{v}_1^{(1)}) = |f^*| e^{\imath \theta_0}$. Suppose that we are interested in θ_{f^*} of f^* at $\mathbf{v}_2^{(K)}$ ($1 \leq K \leq N$), where we assume, without loss of generality, $\mathbf{v}_1^{(i+1)} = \mathbf{v}_2^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, K-1$) by renumbering the indices of triangles and their vertices if necessary. Define a piecewise C^1 path $\Upsilon : [0, K] \rightarrow \bigcup_{i=1}^K \mathcal{T}_i$ by

$$\Upsilon(\tau) := (\tau - i + 1)(\mathbf{v}_2^{(i)} - \mathbf{v}_1^{(i)}) + \mathbf{v}_1^{(i)} \quad \text{for } \tau \in [i-1, i],$$

and then, from Fact 1(ii), $\theta_{f^*}(\mathbf{v}_2^{(K)})$ is expressed as

$$\begin{aligned} \theta_{f^*}(\mathbf{v}_2^{(K)}) &= \theta_0 + \int_0^K \Im \left[\frac{F'_{(0)}(\tau) + \imath F'_{(1)}(\tau)}{F_{(0)}(\tau) + \imath F_{(1)}(\tau)} \right] d\tau, \\ &= \theta_0 + \sum_{i=1}^K \int_0^1 \Im \left[\frac{F_{(0)}^{(i)'}(\tau) + \imath F_{(1)}^{(i)'}(\tau)}{F_{(0)}^{(i)}(\tau) + \imath F_{(1)}^{(i)}(\tau)} \right] d\tau, \end{aligned} \quad (8)$$

where $F_{(k)}(\tau) := f_{(k)}^*(\Upsilon(\tau))$ ($k = 0, 1$) and $F_{(k)}^{(i)}(\tau) := F_{(k)}(\tau + i - 1) = f_{(k)}^*(\Upsilon(\tau + i - 1))$ ($\tau \in [0, 1]$, $k = 0, 1$ and $i = 1, 2, \dots, K$). Since $F_{(k)}^{(i)}(\tau) \in \mathbb{R}[\tau]$ ($k = 0, 1$) are univariate polynomials of degree d at most, all integrals in (8) can be computed analytically by the following method called *algebraic phase unwrapping*^{(33)–(37)}.

Fact 2 ([36]) Let $P_{(k)}(\tau)$ ($k = 0, 1$) be univariate real polynomials, and let $P(\tau) := P_{(0)}(\tau) + \imath P_{(1)}(\tau)$ be a univariate complex polynomial satisfying $P(\tau) \neq 0$ for all $\tau \in [a, b]$. Then, for every $\tau^* \in (a, b]$, we have

$$\begin{aligned} & \int_a^{\tau^*} \Im \left[\frac{P'_{(0)}(\tau) + \imath P'_{(1)}(\tau)}{P_{(0)}(\tau) + \imath P_{(1)}(\tau)} \right] d\tau \\ &= \begin{cases} \arctan(\mathcal{Q}(\tau^*)) + [V(\Psi(\tau^*)) - V(\Psi(a))]\pi & \text{if } P_{(0)}(\tau^*) \neq 0; \\ \frac{\pi}{2} + [V(\Psi(\tau^*)) - V(\Psi(a))]\pi & \text{if } P_{(0)}(\tau^*) = 0; \end{cases} \\ & \quad - \begin{cases} \arctan(\mathcal{Q}(a)) & \text{if } P_{(0)}(a) \neq 0; \\ \text{sgn}(\Psi_0(a)\Psi_1(a)) \frac{\pi}{2} & \text{if } P_{(0)}(a) = 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (9)$$

Input: $P_{(0)}(\tau) \in \mathbb{R}[\tau]$, $P_{(1)}(\tau) \in \mathbb{R}[\tau]$ and $a \in \mathbb{R}$

Output: $(\Psi_j(\tau))_{j=0}^q$

- 1: $\Psi_0(\tau) \leftarrow \frac{P_{(0)}(\tau)}{(\tau-a)^{e_0}}$ (e_0 : order of a as a zero of polynomial $P_{(0)}$)
- 2: $\Psi_1(\tau) \leftarrow \frac{P_{(1)}(\tau)}{(\tau-a)^{e_1}}$ (e_1 : order of a as a zero of polynomial $P_{(1)}$)
- 3: $j \leftarrow 1$
- 4: **while** $\deg(\Psi_j) \geq 1$ ($\deg(\Psi_j)$: degree of polynomial Ψ_j) **do**
- 5: $\Psi_{j+1} \leftarrow -\text{rem}(\Psi_{j-1}, \Psi_j)$
 ($\text{rem}(\Psi_{j-1}, \Psi_j)$: remainder of division of Ψ_{j-1} by Ψ_j)
- 6: $j \leftarrow j + 1$
- 7: **end while**
- 8: $q \leftarrow j$
- 9: Return $(\Psi_j(\tau))_{j=0}^q$

Fig. 1: Algorithm generating $(\Psi_j(\tau))_{j=0}^q$ in Fact 2.

where $\mathcal{Q}(\tau) := P_{(1)}(\tau)/P_{(0)}(\tau)$, $\text{sgn}(x) := x/|x|$ for $x \neq 0$, $\text{sgn}(x) := 0$ for $x = 0$, and $V(\Psi(\tau^*))$, $V(\Psi(a)) \in \mathbb{Z}_+$ are the numbers of sign changes, at $\tau = \tau^*$ and $\tau = a$, in the polynomial sequence $(\Psi_j(\tau))_{j=0}^q$ generated by the algorithm in Fig. 1 (e.g., if $q = 5$, $\tau^* = 1$ and $(\Psi_0(1), \Psi_1(1), \Psi_2(1), \Psi_3(1), \Psi_4(1), \Psi_5(1)) = (3, -2, 5, 1, 0, -2)$, $V(\Psi(\tau^*)) = 3$ because there are three sign changes ($3 \rightarrow -2$), ($-2 \rightarrow 5$) and ($1 \rightarrow -2$)). \square

In [36], we also proposed an alternative way, based on *subresultant theory*⁽⁵⁷⁾, of computation for $V(\Psi(\tau^*))$ and $V(\Psi(a))$ in (9), to resolve certain numerical instabilities caused by polynomial division in the algorithm in Fig. 1. In this report, we use [36, Theorem3] for fast and stable evaluations of $V(\Psi(\tau^*))$ and $V(\Psi(a))$ in (9).

Note that, under the condition $f^*(x, y) \neq 0$ for all $(x, y) \in \Omega$, we can compute $\theta_{f^*}(x, y)$ not only at $(x, y) \in \mathcal{G}$ but also at any $(x, y) \in \Omega$ by repeatedly applying algebraic phase unwrapping. Therefore, unlike many existing algorithms, the proposed scheme gives a smooth θ_{f^*} , as a high-resolution estimate of Θ , which is consistent with the wrapped phase, i.e., $W(\theta_{f^*}(x, y)) \approx \Theta^W(x, y)$ at $(x, y) \in \mathcal{G}$. This approach is particularly effective in the case where phase noise is relatively small.

3.4 Denoising by Selective Smoothing (DSS)

It is well-known that phase noise observed at even small portion of sampling points can create residues which influence the global feature of the results of existing 2D phase unwrapping algorithms^{(1), (2), (58)–(60)}. This has been a central reason of the difficulty in 2D phase unwrapping. In the proposed scheme for noisy wrapped samples, the occurrence of common zeros of $f_{(0)}^*$ and $f_{(1)}^*$ in SPS (or SPS+ or SPS++), which yields the path dependency of θ_{f^*} in APU, can be seen as such a type of difficulty. These facts suggest that excessive fidelity to noisy wrapped samples easily leads to poor estimates in 2D phase unwrapping problem.

To suppress the influence of noise, we denoise the wrapped phase $\Theta^W(x, y)$ to obtain $\tilde{\Theta}^W(x', y') \in (-\pi, \pi]$ ($(x', y') \in \mathcal{G}' \supset \mathcal{G}$) by smoothing Θ^W while keeping the condition $\tilde{\Theta}^W(x, y) = \Theta^W(x, y)$ for all $(x, y) \in \mathcal{G}_1$ ($\subset \mathcal{G}$), where \mathcal{G}_1 is the set of all reliable sampling points. The reliability of each sampling point is judged on the basis of the wrapped phase difference and the residues. The smoothing is realized by using convex optimization. The main idea of *Denoising by Selective Smoothing (DSS)* is divided into the following two substeps.

DSS-1: Classify all sampling points in \mathcal{G} into \mathcal{G}_I (Type I: reliable) and $\mathcal{G}_{II} := \mathcal{G} \setminus \mathcal{G}_I$ (Type II: unreliable) by using the information of $W(\Delta\Theta_i^W)$ and residues.

DSS-2: Produce smoothed wrapped samples $\tilde{\Theta}^W(x, y) \in (-\pi, \pi]$ at $(x, y) \in \mathcal{G}' (\supset \mathcal{G})$, where $\tilde{\Theta}^W$ satisfies

$$\tilde{\Theta}^W(x, y) = \Theta^W(x, y) \quad \text{if } (x, y) \in \mathcal{G}_I$$

and $\tilde{\Theta}^W(x, y)$ at $(x, y) \in \mathcal{G}' \setminus \mathcal{G}_I$ is determined by interpolation of a minimizer of the following convex function:

$$\tilde{J}(\Theta) := \|\mathbf{D}_1\Theta - \delta\|_{1, \mathbf{w}_1} + \|\mathbf{D}_2\Theta\|_{2, \mathbf{w}_2}^2,$$

where we express $\sum_i w_i |\Delta\Theta_i - W(\Delta\Theta_i^W)|$ in J as $\|\mathbf{D}_1\Theta - \delta\|_{1, \mathbf{w}_1}$ in \tilde{J} , and $\|\mathbf{D}_2\Theta\|_{2, \mathbf{w}_2}^2$ stands for the square of an weighted ℓ_2 norm of the second order differences of Θ .

For more details on DSS, see [61].

4 Application to Terrain Height Estimation

In this section, we apply the proposed 2D phase unwrapping scheme to terrain height estimation by InSAR.

4.1 Terrain Height Estimation by InSAR

Interferometric synthetic aperture radar (InSAR)⁽³⁾⁻⁹⁾ is an imaging technique allowing highly accurate measurements of surface topography in all weather conditions, day or night. In InSAR system (see Fig. 2(a)), Antenna 1 and Antenna 2 on-board an aircraft or a spacecraft platform transmit coherent broadband radio signals and receive the reflected signals $s_k := |s_k|e^{-i(\frac{4\pi R_k}{\lambda} + \phi_k + \nu_k)}$ ($k = 1, 2$) from a target corresponding to $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$, where λ is the wavelength of the transmitted signal, R_k is the distance from Antenna k to the target, ϕ_k is the backscatter phase delay, ν_k is additive phase noise, and the dependencies of variables $R_k, \phi_k, \nu_k, \theta_o$ and θ_i on (x, y) are omitted for notational simplicity in Fig. 2 and in the discussion below. Since the backscatter phase delay ϕ_k is determined by the shape of the target, geological condition, and weather condition, we can expect $\phi_1 = \phi_2$ in many situations, and hence the interferometric image is obtained as

$$\bar{s}_1 s_2 = |s_1| |s_2| e^{i(\frac{4\pi(R_1 - R_2)}{\lambda} + \nu)}, \quad (10)$$

where \bar{s}_1 denotes the complex conjugate of s_1 and $\nu := \nu_1 - \nu_2$. The *interferometric phase* $\Theta_{\text{int}} := 4\pi(R_1 - R_2)/\lambda$ can also be expressed, from the simple geometric relation in Fig. 2(a) and the law of cosines, as

$$\Theta_{\text{int}} = \frac{4\pi}{\lambda} \left\{ R_1 - \sqrt{R_1^2 + B^2 - 2R_1 B \sin(\theta_o - \alpha)} \right\},$$

and its noisy wrapped samples $\Theta_{\text{int}}^W := W(\Theta_{\text{int}} + \nu)$ are observed from (10).

Suppose that we know the height at (x_0, y_0) as H_0 (see Fig. 2(b)). Then we compute the reference phase $\Theta_{\text{ref}} := 4\pi(R_1 - R_2^{H_0})/\lambda$ expressed as

$$\Theta_{\text{ref}} = \frac{4\pi}{\lambda} \left\{ R_1 - \sqrt{R_1^2 + B^2 - 2R_1 B \sin(\theta_o^{H_0} - \alpha)} \right\}$$

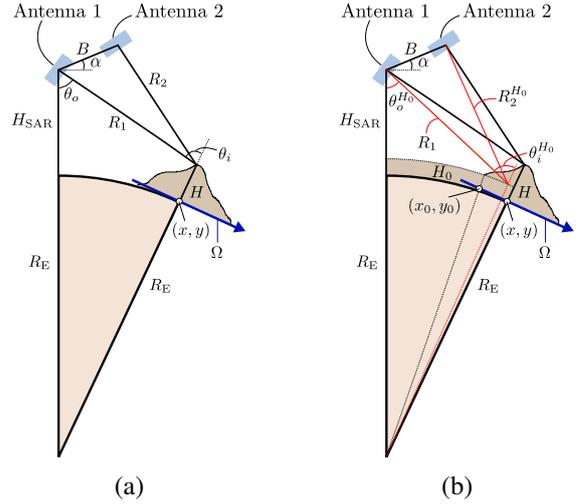


Fig. 2: Outline drawing of terrain height estimation by InSAR. (a) Sectional view for the construction of the interferometric phase. (b) Sectional view for the construction of the reference phase.

s.t. $\cos \theta_o^{H_0} = \frac{R_1^2 + (R_E + H_{\text{SAR}})^2 - (R_E + H_0)^2}{2R_1(R_E + H_{\text{SAR}})}$, which is a virtual interferometric phase assuming that the terrain height is always H_0 . Note that the reference phase can be computed because we can compute $\theta_o^{H_0}$ unlike θ_o . Define the 2D unwrapped phase as $\Theta := \Theta_{\text{int}} - \Theta_{\text{ref}}$. To estimate terrain height H , as a refinement of [62, Equation A.2.3], we newly derive the following relation:

$$\Theta \approx \frac{4\pi B \cos(\theta_o^{H_0} - \alpha)(H - H_0)}{\lambda \sin \theta_i^{H_0} \sqrt{R_1^2 + B^2 - 2R_1 B \sin(\theta_o^{H_0} - \alpha)}}, \quad (11)$$

where $\theta_i^{H_0}$ in Fig. 2(b) can be computed from $\sin \theta_i^{H_0} = \frac{(R_E + H_{\text{SAR}}) \sin \theta_o^{H_0}}{R_E + H_0}$. The wrapped phase $\Theta^W := W(\Theta_{\text{int}} - \Theta_{\text{ref}} + \nu) = W(\Theta^W - \Theta_{\text{ref}})$ is obtained from (10) and Θ_{ref} . After reconstructing Θ from Θ^W via 2D phase unwrapping, terrain height H is estimated from (11).

4.2 Parameter Settings of The Proposed Scheme

Assume that noisy wrapped samples Θ^W are observed on rectangular grid points $\mathcal{G} := \{(x_i, y_j)\}_{j=0,1,\dots,m}^{i=0,1,\dots,n}$ s.t. $x_i - x_{i-1} =: h_x > 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$) and $y_j - y_{j-1} =: h_y > 0$ ($j = 1, 2, \dots, m$) in $\Omega := [x_0, x_n] \times [y_0, y_m]$.

In DSS, the denoised wrapped samples $\tilde{\Theta}^W$ on $\mathcal{G}' := \{(x'_i, y'_j)\}_{j=0,1,\dots,lm}^{i=0,1,\dots,ln}$ s.t. $x'_0 = x_0, x'_{ln} = x_n, y'_0 = y_0, y'_{lm} = y_m, x'_i - x'_{i-1} = h_x/l$ ($i = 1, 2, \dots, ln$), and $y'_j - y'_{j-1} = h_y/l$ ($j = 1, 2, \dots, lm$) are obtained by using $l = 3, \mathbf{w}_1 = \mathbf{1}$ and $\mathbf{w}_2 = \frac{1}{100}\mathbf{1}$.

After DSS, we use SPS+ to obtain the smoothest bivariate spline functions $f_{(k)}^* \in \mathcal{S}_4^2(\Delta_{\dagger})$ ($k = 0, 1$), where Δ_{\dagger} is a crisscross partition by diagonally cutting every rectangle $[x'_i, x'_{i+1}] \times [y'_j, y'_{j+1}]$ into four triangles. In SPS+, we set $\epsilon_{(0)}(x, y) = \epsilon_{(1)}(x, y) = 0$ for $(x, y) \in \mathcal{G}_I$ to guarantee

$$W(\theta_{f^*}(x, y)) = \Theta^W(x, y) \quad \text{for all } (x, y) \in \mathcal{G}_I, \quad (12)$$

and we set $\epsilon_{(0)}(x, y) = 0.5 - 0.5|\cos(\tilde{\Theta}^W(x, y))|$ and $\epsilon_{(1)}(x, y) = 0.5 - 0.5|\sin(\tilde{\Theta}^W(x, y))|$ for $(x, y) \in \mathcal{G}' \setminus \mathcal{G}_I$ because $\tilde{\Theta}^W$ is influenced by smoothing effect of DSS and $\mathcal{G}_{II} \subset \mathcal{G}' \setminus \mathcal{G}_I$.

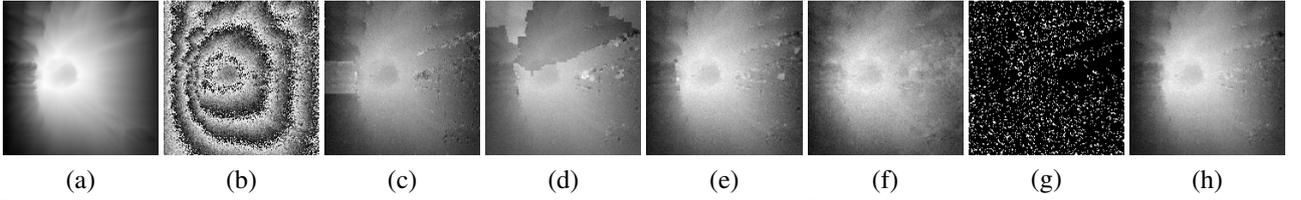


Fig. 3: Comparison of the proposed 2D phase unwrapping and the existing 2D phase unwrapping (I): (a) unwrapped phase Θ (to be estimated), (b) wrapped phase Θ^W , (c) estimate by BC (MSE = 1.7587), (d) estimate by MST (MSE = 8.2192), (e) estimate by MCF (MSE = 0.0974), (f) estimate by LS (MSE = 20.4673), (g) distribution of Type I (white) and Type II (black), and (h) estimate by the proposed scheme (DSS, SPS+ and APU) (MSE = 0.0379), where MSE is the mean square error of each estimate, i.e., $MSE := \frac{1}{32761} \sum_{i=0}^{180} \sum_{j=0}^{180} |\Theta_{i,j} - \Theta_{i,j}^*|^2$ (Θ^* : estimate).

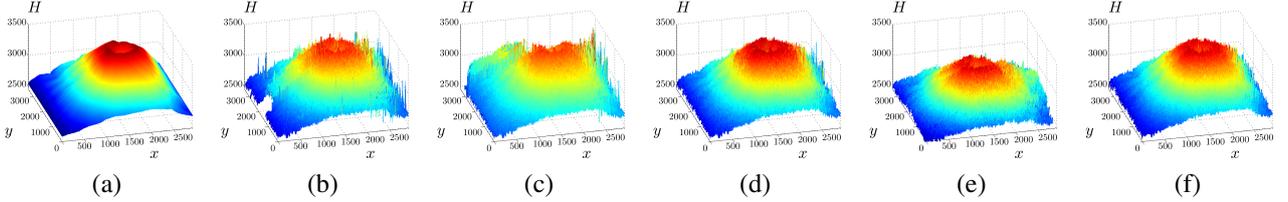


Fig. 4: Comparison of terrain height estimations based on the proposed 2D phase unwrapping and the existing 2D phase unwrapping (I): (a) test mountain of height H (to be estimated), (b) estimate by BC (MAE = 37.6844), (c) estimate by MST (MAE = 87.1949), (d) estimate by MCF (MAE = 26.9321), (e) estimate by LS (MAE = 162.3990), and (f) estimate by the proposed scheme (DSS, SPS+ and APU) (MAE = 23.2882), where MAE is the mean absolute error of each estimate, i.e., $MAE := \frac{1}{32761} \sum_{i=0}^{180} \sum_{j=0}^{180} |H_{i,j} - H_{i,j}^*|$ (H^* : estimate).

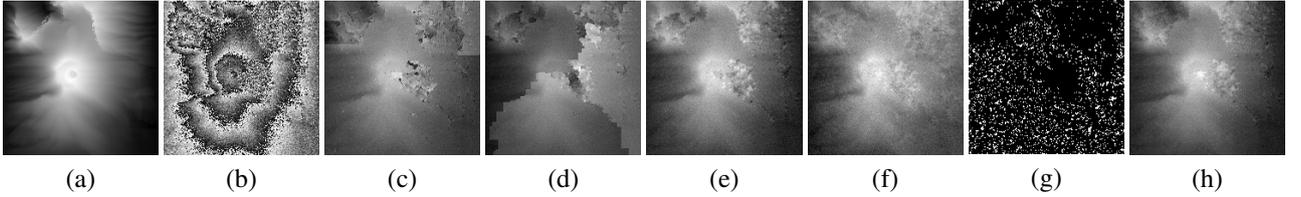


Fig. 5: Comparison of the proposed 2D phase unwrapping and the existing 2D phase unwrapping (II): (a) unwrapped phase Θ (to be estimated), (b) wrapped phase Θ^W , (c) estimate by BC (MSE = 2.5410), (d) estimate by MST (MSE = 49.4547), (e) estimate by MCF (MSE = 1.4087), (f) estimate by LS (MSE = 5.8364), (g) distribution of Type I (white) and Type II (black), and (h) estimate by the proposed scheme (DSS, SPS+ and APU) (MSE = 0.2011).

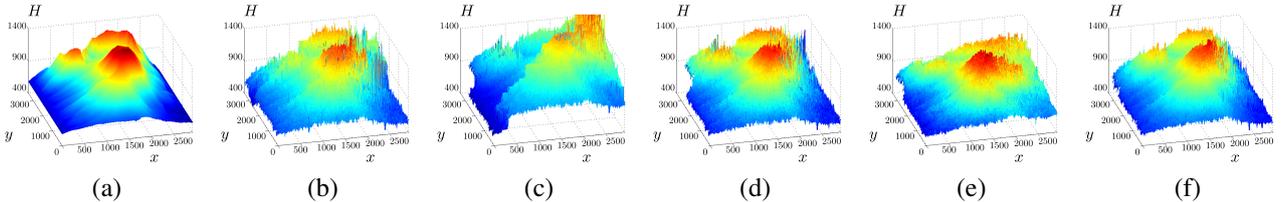


Fig. 6: Comparison of terrain height estimations based on the proposed 2D phase unwrapping and the existing 2D phase unwrapping (II): (a) test mountain of height H (to be estimated), (b) estimate by BC (MAE = 52.1210), (c) estimate by MST (MAE = 210.7460), (d) estimate by MCF (MAE = 41.1130), (e) estimate by LS (MAE = 86.7128), and (f) estimate by the proposed scheme (DSS, SPS+ and APU) (MAE = 30.3923).

4.3 Numerical Experiments

We demonstrate the effectiveness of the proposed 2D phase unwrapping scheme by terrain height estimation based on (11). Figure 3(a) shows the unwrapped phase Θ generated from a test mountain shown in Fig. 4(a). Here we set the parameters of InSAR system by $\alpha = \pi/6$ [rad], $\lambda = 23.5$ [cm], $B = 500$ [m], $H_{\text{SAR}} = 800$ [km], $R_E = 6371$ [km], $R_1(x_0, y_0) = 1243$ [km], and $H(x_0, y_0) = H_0 = 2530$ [m]. Figure 3(b) depicts the wrapped phase Θ^W on $\mathcal{G} := \{(x_i, y_j)\}_{j=0,1,\dots,180}^{i=0,1,\dots,180}$ s.t. $h_x = 16.2$ [m] and $h_y = 19.5$ [m], where additive phase noise ν is generated by [63]. Figures 3(c), 3(d), 3(e), and 3(f) respectively depict the estimates of Θ by *branch cut* (BC)⁵, *minimum*

spanning tree (MST)²⁷, *minimum cost flow* (MCF)²⁸ (all weights are ‘1’), and *least squares* (LS)²⁹ (all weights are ‘1’). Figure 3(g) shows the distribution of samples of Type I and Type II from which we see that samples of Type I distribute sparsely but almost uniformly over Ω . Figure 3(h) depicts the estimate of Θ by the proposed scheme (DSS, SPS+ and APU). Figures 4(b), 4(c), 4(d), 4(e), and 4(f) show the mountains constructed from the results in Fig. 3 and (11). Figures 3 and 4 show that the proposed scheme achieves the best performance compared with the other algorithms visually as well as numerically.

Figure 5(a) shows the unwrapped phase Θ generated from another test mountain in Fig. 6(a). The parameter

settings of InSAR system, the proposed scheme, and the other algorithms are same as those used in the first simulation except for $R_1(x_0, y_0) = 1244$ [km] and $H(x_0, y_0) = H_0 = 579$ [m]. Figure 5(b) depicts the noisy wrapped phase Θ^W on $\mathcal{G} := \{(x_i, y_j)\}_{i=0,1,\dots,180, j=0,1,\dots,180}$. Figures 5(c), 5(d), 5(e), and 5(f) respectively depict the estimates of Θ by BC, MST, MCF, and LS. Figure 5(g) shows the distribution of samples of Type I and Type II from which we see that samples of Type I of this example also distribute sparsely but almost uniformly over Ω . Figure 5(h) depicts the estimate by the proposed scheme (DSS, SPS+ and APU). Figures 6(b), 6(c), 6(d), 6(e), and 6(f) show the mountains based on the results in Fig. 5 and (11). In this example, the proposed scheme achieves again the best performance compared with the other algorithms.

References

- 1) D. C. Ghiglia and M. D. Pritt: *Two-Dimensional Phase Unwrapping: Theory, Algorithms, and Software*, Wiley (1998)
- 2) L. Ying: Phase unwrapping, *Wiley Encyclopedia of Biomedical Engineering, 6-Volume Set*, Wiley (2006)
- 3) L. C. Graham: Synthetic interferometer radar for topographic mapping, *Proceedings of the IEEE*, **62-6**, 763/768 (1974)
- 4) H. A. Zebker and R. M. Goldstein: Topographic mapping from interferometric synthetic aperture radar observations, *Journal of Geophysical Research*, **91-B5**, 4993/4999 (1986)
- 5) R. M. Goldstein, H. A. Zebker, and C. L. Werner: Satellite radar interferometry: Two-dimensional phase unwrapping, *Radio Science*, **23-4**, 713/720 (1988)
- 6) A. Moccia and S. Vetrilla: A tethered interferometric synthetic aperture radar (SAR) for a topographic mission, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, **30-1**, 103/109 (1992)
- 7) P. A. Rosen, S. Hensley, I. R. Joughin, F. K. Li, S. N. Madson, E. Rodriguez, and R. M. Goldstein: Synthetic aperture radar interferometry, *Proceedings of the IEEE*, **88-3**, 333/382 (2000)
- 8) D. Leva, G. Nico, D. Tarchi, J. Fortuny, and A. J. Sieber: Temporal analysis of a landslide by means of a ground-based SAR interferometer, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, **4-4**, 745/752 (2003)
- 9) C. Colesanti and J. Wasowski: Investigating landslides with space-borne synthetic aperture radar (SAR) interferometry, *Engineering Geology*, **88-3-4**, 173/199 (2006)
- 10) C. W. Chen and H. A. Zebker: Two-dimensional phase unwrapping with use of statistical models for cost functions in nonlinear optimization, *Journal of the Optical Society of America A: Optics, Image Science, and Vision*, **18-2**, 338/351 (2001)
- 11) C. de Moustier and H. Matsumoto: Seafloor acoustic remote sensing with multibeam echo-sounders and bathymetric sidescan sonar systems, *Marine Geophysical Researchers*, **15-1**, 27/42 (1993)
- 12) P. N. Denbigh: Signal processing strategies for a bathymetric sidescan sonar, *IEEE Journal of Oceanic Engineering*, **19-3**, 382/390 (1994)
- 13) R. E. Hansen, T. O. Sæbø, K. Gade, and S. Chapman: Signal processing for AUV based interferometric synthetic aperture sonar, *Proceedings of MTS/IEEE OCEANS'03*, **5**, 2438/2444 (2003)
- 14) M. P. Hayes and P. T. Gough: Synthetic aperture sonar: A review of current status, *IEEE Journal of Oceanic Engineering*, **34-3**, 207/224 (2009)
- 15) V. Srinivasan, H. C. Liu, and M. Halioua: Automated phase-measuring profilometry: a phase mapping approach, *Applied Optics*, **24-2**, 185/188 (1985)
- 16) H. Zhao, W. Chen, and Y. Tan: Phase-unwrapping algorithm for the measurement of three-dimensional object shapes, *Applied Optics*, **33-20**, 4497/4500 (1994)
- 17) P. S. Huang, C. Zhang, and F. P. Chiang: High-speed 3-D shape measurement based on digital fringe projection, *Optical Engineering*, **42-1**, 163/168 (2003)
- 18) S. Zhang: Recent progresses on real-time 3D shape measurement using digital fringe projection techniques, *Optics and Lasers in Engineering*, **48-2**, 149/158 (2010)
- 19) P. Cloetens, W. Ludwig, J. Baruchel, D. Van Dyck, J. Van Landuyt, J. P. Guigay, and M. Schlenker: Holotomography: Quantitative phase tomography with micrometer resolution using hard synchrotron radiation x rays, *Applied Physics Letters*, **75-19**, 2912/2914 (1999)
- 20) T. Weitkamp, A. Diaz, C. David, F. Pfeiffer, M. Stampanoni, P. Cloetens, and E. Ziegler: X-ray phase imaging with a grating interferometer, *Optics Express*, **13-16**, 6296/6304 (2005)
- 21) A. Momose, W. Yashiro, Y. Takeda, Y. Suzuki, and T. Hattori: Phase tomography by X-ray Talbot interferometry for biological imaging, *Japanese Journal of Applied Physics*, **45-6A**, 5254/5262 (2006)
- 22) M. Dierolf, A. Menzel, P. Thibault, P. Schneider, C. M. Kewish, R. Wepf, O. Bunk, and F. Pfeiffer: Ptychographic X-ray computed tomography at the nanoscale, *Nature*, **467-7314**, 436/439 (2010)
- 23) G. H. Glover and E. Schneider: Three-point Dixon technique for true water/fat decomposition with B_0 inhomogeneity correction, *Magnetic Resonance in Medicine*, **18-2**, 371/383 (1991)
- 24) J. Szumowski, W. R. Coshov, F. Li, and S. F. Quinn: Phase unwrapping in the three-point Dixon method for fat suppression MR imaging, *Radiology*, **192-2**, 555/561 (1994)
- 25) S. M. Song, S. Napel, N. J. Pelc, and G. H. Glover: Phase unwrapping of MR phase images using Poisson equation, *IEEE Transactions on Image Processing*, **4-5**, 667/676 (1995)
- 26) S. Chaves, Q. S. Xiang, and L. An: Understanding phase maps in MRI: a new outline phase unwrapping method, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, **21-8**, 966/977 (2002)
- 27) C. W. Chen and H. A. Zebker: Network approaches to two-dimensional phase unwrapping: intractability and two new algorithms, *Journal of the Optical Society of America A: Optics, Image Science, and Vision*, **17-3**, 401/414 (2000)
- 28) M. Costantini: A novel phase unwrapping method based on network programming, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, **36-3**, 813/821 (1998)
- 29) D. C. Ghiglia and L. A. Romero: Robust two-dimensional weighted and unweighted phase unwrapping that uses fast transforms and iterative methods, *Journal of the Optical Society of America A: Optics, Image Science, and Vision*, **11-1**, 107/117 (1994)
- 30) B. W. Silverman: Some aspects of the spline smoothing approach to non-parametric regression curve fitting, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, **47-1**, 1/52 (1985)
- 31) G. Wahba: *Spline Models for Observational Data*, SIAM (1990)
- 32) J. O. Ramsay and B. W. Silverman: *Functional Data Analysis*, Springer (2005)
- 33) I. Yamada, K. Kurosawa, H. Hasegawa, and K. Sakaniwa: Algebraic multidimensional phase unwrapping and zero distribution of complex polynomials—Characterization of multivariate stable polynomials, *IEEE Transactions on Signal Processing*, **46-6**, 1639/1664 (1998)
- 34) I. Yamada and N. K. Bose: Algebraic phase unwrapping and zero distribution of polynomial for continuous-time systems, *IEEE Transactions on Circuits and Systems—Part I: Fundamental Theory and Applications*, **49-3**, 298/304 (2002)

- 35) I. Yamada and K. Oguchi: High-resolution estimation of the directions-of-arrival distribution by algebraic phase unwrapping algorithms, *Multidimensional Systems and Signal Processing*, **22**-1-3, 191/211 (2011)
- 36) D. Kitahara and I. Yamada: Algebraic phase unwrapping along the real axis: extensions and stabilizations, *Multidimensional Systems and Signal Processing*, **26**-1, 3/45 (2015)
- 37) D. Kitahara and I. Yamada: Algebraic phase unwrapping for functional data analytic estimations—extensions and stabilizations, *Proceedings of IEEE International Conference on Acoustics, Speech and Signal Processing (ICASSP'13)*, 5835/5839 (2013)
- 38) C. K. Chui and M. J. Lai: Multivariate vertex splines and finite elements, *Journal of Approximation Theory*, **60**-3, 245/343 (1990)
- 39) G. Farin: Triangular Bernstein-Bézier patches, *Computer Aided Geometric Design*, **3**-2, 83/127 (1986)
- 40) A. Galbis and M. Maestre: *Vector Analysis Versus Vector Calculus*, Springer (2012)
- 41) C. de Boor: Best approximation properties of spline functions of odd degree, *Journal of Mathematics and Mechanics*, **12**-5, 747/749 (1963)
- 42) J. H. Ahlberg, E. N. Nilson, and J. L. Walsh: *The Theory of Splines and Their Applications*, Academic Press (1967)
- 43) V. Pretlovà: Bicubic spline smoothing of two-dimensional geophysical data, *Studia Geophysica et Geodaetica*, **20**-2, 168/177 (1976)
- 44) E. J. Wegman and I. W. Wright: Splines in statistics, *Journal of the American Statistical Association*, **78**-382, 351/365 (1983)
- 45) M. Unser, Splines: A perfect fit for signal and image processing, *IEEE Signal Processing Magazine*, **16**-6, 22/38 (1999)
- 46) M. J. Lai: Multivariate splines and their applications, *Computational Complexity: Theory, Techniques, and Applications*, 1939/1980 (2012)
- 47) E. Quak and L. L. Schumaker: Calculation of the energy of a piecewise polynomial surface, *Algorithms for Approximation II*, 134/143 (1990)
- 48) D. Goldfarb and S. Liu: An $O(n^3L)$ primal interior point algorithm for convex quadratic programming, *Mathematical Programming*, **49**-1, 325/340 (1990)
- 49) Y. Nesterov and A. Nemirovskii: *Interior-Point Polynomial Algorithms in Convex Programming*, SIAM (1994)
- 50) J. Nocedal and S. J. Wright: *Numerical Optimization*, Springer (2006)
- 51) I. Yamada: The hybrid steepest descent method for the variational inequality problem over the intersection of fixed point sets of nonexpansive mappings, *Inherently Parallel Algorithms in Feasibility and Optimization and their Applications*, 473/504 (2001)
- 52) I. Yamada, N. Ogura, and N. Shirakawa: A numerically robust hybrid steepest descent method for the convexly constrained generalized inverse problems, *Inverse Problems, Image Analysis, and Medical Imaging*, 269/305 (2002)
- 53) N. Ogura and I. Yamada: Nonstrictly convex minimization over the bounded fixed point set of a nonexpansive mapping, *Numerical Functional Analysis and Optimization*, **24**-1-2, 129/135 (2003)
- 54) I. Yamada and N. Ogura: Hybrid steepest descent method for variational inequality problem over the fixed point sets of certain quasi-nonexpansive mappings, *Numerical Functional Analysis and Optimization*, **25**-7-8, 619/655 (2005)
- 55) I. Yamada, M. Yukawa, and M. Yamagishi: Minimizing the moreau envelope of nonsmooth convex functions over the fixed point set of certain quasi-nonexpansive mappings, *Fixed-Point Algorithms for Inverse Problems in Science and Engineering*, 345/390 (2011)
- 56) S. Ono and I. Yamada: Hierarchical convex optimization with primal-dual splitting, *IEEE Transactions on Signal Processing*, **2**-63, 373/388 (2015)
- 57) W. S. Brown and J. F. Traub: On Euclid's algorithm and the theory of subresultants, *Journal of the ACM*, **18**-4, 505/514 (1971)
- 58) H. A. Zebker and Y. Lu: Phase unwrapping algorithms for radar interferometry: residue-cut, least-squares, and synthesis algorithms, *Journal of the Optical Society of America A: Optics, Image Science, and Vision*, **15**-3, 586/598 (1998)
- 59) H. Braunisch, B. Wu, and J. A. Kong: Phase unwrapping of SAR interferograms after wavelet denoising, *Proceedings of IEEE International Geoscience and Remote Sensing Symposium (IGARSS'00)*, **2**, 752/754 (2000)
- 60) A. Suksmo and A. Hirose: Adaptive noise reduction of InSAR images based on a complex-valued MRF model and its application to phase unwrapping problem, *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, **40**-3, 699/709 (2002)
- 61) D. Kitahara and I. Yamada: Algebraic phase unwrapping based on two-dimensional spline smoothing over triangles, *IEEE Transactions on Signal Processing*, (accepted for publication)
- 62) A. Ferretti, A. Monti-Guarnieri, C. Prati, F. Rocca, and D. Massonnet: *InSAR Principles: Guidelines for SAR Interferometry Processing and Interpretation*, ESA Publications (2007)
- 63) B. Kampes, E. Steenbergen, and R. Hanssen: *InSAR Matlab toolbox*, http://doris.tudelft.nl/Doris_download.html (2005)

幾何学的代数の要旨

○金谷健一（岡山大学名誉教授）

Essence of Geometric Algebra

*Kenichi Kanatani (Professor Emeritus, Okayama University)

Abstract— With a view to understanding geometric algebra, which has recently been attracting attention for its potentially important role in physics (e.g., mechanics, electromagnetism, quantum mechanics, and theory of relativity), and engineering (e.g., robotics control, computer vision, and computer graphics), we describe in elementary terms its background topics, including Hamilton's quaternion algebra, Grassmann algebra, Clifford algebra, Grassmann–Cayley algebra, and Hestenes' conformal geometry. The equations are restricted within the limits of high-school and first-year college mathematics, without requiring any specific mathematical knowledge.

Key Words: Hamilton's quaternion, Grassmann algebra, Clifford algebra

1 幾何学的代数とは何か

本稿では最近、物理学（力学、電磁気学、量子力学、相対性理論など）や工学（ロボット制御、コンピュータビジョン、コンピュータグラフィクスなど）で重要な役割を果たすことが期待され、注目されている幾何学的代数を概説する。

「幾何学的代数」とは要するに、「ハミルトン代数」と「グラスマン代数」を統合した「クリフォード代数」に「グラスマン–ケイリー代数」（～射影幾何学）と「共形幾何学」を組み合わせたものである。これを理解するには、直接に幾何学的代数を学ぶより、その背景要素を理解するほうが早道である。本稿は参考文献^{1, 2)}に基づいている。

歴史的にはハミルトン代数とグラスマン代数が19世紀に構築され、それが二つの逆方向に進展した。すなわち、より一般的な抽象代数に発展させたのが英国の数学者クリフォードであり、逆に物理学の記述に必要最小限に簡素化したのが米国の物理学者ギブスである。後者が「ベクトル解析」と呼ばれ、今日世界中のすべての大学の理工系の初年次に教えられているのに対して、クリフォード代数は20世紀末に米国の物理学者ヘステネスがとりあげるまで、一部の数学者を除いてほとんど忘れられていた。

2 代数系

英語の algebra という語には二つの意味がある。一つは記号に演算を施す学問体系という意味であり、もう一つは加減、定数倍、積が定義される集合という意味である。混乱を防ぐために、以下では前者を「代数学」、後者を「代数系」（「多元環」と訳されることもある）と読んで区別する。

加減、定数倍が定義される集合は「ベクトル空間」（「線形空間」とも呼ばれる）であるから、代数系とは要するにベクトル空間に積を定義したものである。要素の和は形式的なものでよく、単なる和集合とみなしてよい。例えば2個のみかんと3個のりんごを足した和は、みかん2個りんご3個から成る集合であり、これに3個のみかんを足すと、みかん5個とりんご3個から成る集合となる。このような形式的な和を「形式和」（formal sum）と呼ぶ。

3 四元数

複素数の集合 \mathbb{C} は実数と記号 i からなる代数系であり、記号間の積を $i^2 = -1$ と約束する。この代数系は平面上の点集合とみなせ、2次元ベクトルの演算と同一視できる。そして、単位ベクトルとの積はその偏角だけの回転に対応する。ハミルトンはこれを3次元空間に拡張しようと考え、新たな記号 j を導入して $j^2 = -1$ と約束した。そして、複素数の3次元版 $p = x + iy + jz$ を考えた。すると、加減算に関する限り、3次元ベクトルの演算と同一視できるが、これと $q = u + iw + jv$ との積は $pq = (xu - yv - zw) + i(xv + yu) + j(xw + zu) + ijyw + jizv$ となり、閉じた代数系が定義できない。

ハミルトンは長くこれに悩んでいたが、1843年10月16日に妻と散歩中に突然解決法を思いついた。それは $k^2 = -1$ となる新たな記号 k を導入した4次元空間を考えて、 $ij = -ji = k$ と約束すればよいということである。その経緯はアイルランドのダブリンのブルーム橋の記念銘板に刻まれている。

4 ハミルトン代数系

実数と記号 i, j, k からなる代数系を考え、積（四元数積）を次のように約束する。

$$i^2 = j^2 = k^2 = -1,$$

$$ij = k, \quad jk = i, \quad ki = j,$$

$$ji = -ij, \quad kj = -jk, \quad ik = -ki \quad (1)$$

この代数系を「ハミルトン代数系」と呼ぶ。ベクトル空間とみると、4個の元 $1, i, j, k$ を基底とする4次元空間となる。

この代数系の元（「四元数」と呼ぶ）は $q = \alpha + xi + yj + zk$ の形をしている。 α を「スカラー部」、 $xi + yj + zk$ を「ベクトル部」と呼ぶ。ベクトル部 $\mathbf{q} = xi + yj + zk$ を成分が x, y, z のベクトルと同一視すると、四元数 q はスカラー α とベクトル \mathbf{q} の形式和 $q = \alpha + \mathbf{q}$ とみなせる。

ベクトル \mathbf{a}, \mathbf{b} を四元数とみなした積は、定義から計算すると次のように書ける。

$$\mathbf{ab} = -\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle + \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad (2)$$

ただし, $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$, $\mathbf{a} \times \mathbf{b}$ はそれぞれ通常のベクトルの内積, ベクトル積である. すなわち, 四元数積は内積とベクトル積を同時に計算しているとみなせる.

四元数 $q = \alpha + \mathbf{a}$ の「共役四元数」を $q^\dagger = \alpha - \mathbf{a}$ と定義し, 「ノルム」を次のように定義する.

$$\|q\|^2 \equiv qq^\dagger = \alpha^2 + \|\mathbf{a}\|^2 (= q^\dagger q) \quad (3)$$

これから $q(q^\dagger/\|q\|^2) = (q^\dagger/\|q\|^2)q = 1$ であり, すべての四元数 $q (\neq 0)$ にその「逆元」 $q^{-1} = q^\dagger/\|q\|^2$ が存在して, $qq^{-1} = q^{-1}q = 1$ であることがわかる. 逆元が存在する代数系は「体」と呼ばれる. 四元数全体は体となる. 四元数を用いる最大の利点は回転が表せることである. (四元数で表した) ベクトル \mathbf{x} を軸 \mathbf{l} (単位ベクトル) の右ねじ周りに角度 Ω (ラジアン) だけ回したベクトル \mathbf{x}' とすると, 次のように表せる.

$$\mathbf{x}' = q\mathbf{x}q^\dagger, \quad q \equiv \cos \frac{\Omega}{2} + \mathbf{l} \sin \frac{\Omega}{2} \quad (4)$$

このように作用する四元数 q を「回転子」と呼ぶ.

5 外積

原点を含み, ベクトル \mathbf{a} の方向の直線を \mathbf{a} で表す. この直線の長さは無限であるが, 「強度」 $\|\mathbf{a}\|$ を持つとみなす. 原点を含み, ベクトル \mathbf{a} , \mathbf{b} の張る平面を $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ で表す. このように二つのベクトルを \wedge (「外積」と呼ぶ) で結んだものを「二重ベクトル」(bivector) と呼ぶ. この平面の面積は無限であるが, 「強度」 $\|\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}\| \equiv$ (ベクトル \mathbf{a} , \mathbf{b} の作る平行四辺形の面積) を持つとみなす. 原点を含み, ベクトル \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} の張る空間を $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$ で表す. このように三つのベクトルの外積を「三重ベクトル」(trivector) と呼ぶ. この空間の体積は無限であるが, 「強度」 $\|\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}\| \equiv$ (ベクトル \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} の作る平行六面体の体積) を持つとみなす. 外積は次元の低い部分空間を組み合わせると, より高い次元の部分空間を定義するものであり, 定義より次の性質をもつ.

- $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} = -\mathbf{b} \wedge \mathbf{a}$: 順序を変えると平面の符号が変わる (裏返される).
- $\mathbf{a} \wedge \mathbf{a} = 0$: 一つのベクトルでは平面が定義できない (“0” は非存在を表す)
- $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} = \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} \wedge \mathbf{a} = \mathbf{c} \wedge \mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$: 循環置換しても定義される空間は同じ.
- $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} = -\mathbf{b} \wedge \mathbf{a} \wedge \mathbf{c} = -\mathbf{c} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{a} = -\mathbf{a} \wedge \mathbf{c} \wedge \mathbf{b}$: 二つを入れ換えると空間の符号が変わる (裏返される).
- $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{b} = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{a} = \mathbf{a} \wedge \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} = 0$: 二つのベクトルでは空間が定義できない.
- $\mathbf{a} \wedge (\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}) = (\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}) \wedge \mathbf{c} = \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$: 直線 \mathbf{a} と平面 $\mathbf{b} \wedge \mathbf{c}$ の定義する空間も, 平面 $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ と直線 \mathbf{c} との定義する空間も, \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} の定義する空間と同じ.
- $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} \wedge \mathbf{d} = 0, \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} \wedge \mathbf{d} = 0, \dots$: 3次元空間には3次元以上の空間が定義できない.

6 グラスマン代数系

実数と記号 e_1, e_2, e_3 からなる代数系を考え, 積 \wedge (外積) を次のように約束する.

$$e_i \wedge e_j = -e_j \wedge e_i, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (5)$$

したがって, $e_i \wedge e_i = 0, i = 1, 2, 3$ である. 各元は次の形の形式和 (「多重ベクトル」(multivector) と呼ぶ) となる.

$$\begin{aligned} \mathcal{C} = & \underbrace{\alpha}_{\text{スカラ部}} + \underbrace{a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3}_{\text{ベクトル部}} \\ & + \underbrace{b_1 e_2 \wedge e_3 + b_2 e_3 \wedge e_1 + b_3 e_1 \wedge e_2}_{\text{二重ベクトル部}} \\ & + \underbrace{c e_1 \wedge e_2 \wedge e_3}_{\text{三重ベクトル部}} \end{aligned} \quad (6)$$

このような多重ベクトルから成る代数系を「グラスマン代数系」と呼ぶ. ベクトル空間とみると, 8個の元 $1, e_i, e_i \wedge e_j, e_i \wedge e_j \wedge e_k, i, j = 1, 2, 3$ を基底とする8次元空間となる.

二重ベクトルと三重ベクトルの「双対」を基底によって次のように定義する.

$$\begin{aligned} (e_2 \wedge e_3)^* &= e_1, \quad (e_3 \wedge e_1)^* = e_2, \quad (e_1 \wedge e_2)^* = e_3, \\ (e_1 \wedge e_2 \wedge e_3)^* &= 1 \end{aligned} \quad (7)$$

ベクトル $\mathbf{a} = a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3$, $\mathbf{b} = b_1 e_1 + b_2 e_2 + b_3 e_3$, $\mathbf{c} = c_1 e_1 + c_2 e_2 + c_3 e_3$ をグラスマン代数系の元とみなすと, 次のように書ける.

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} = & (a_2 b_3 - a_3 b_2) e_2 \wedge e_3 + (a_3 b_1 - a_1 b_3) e_3 \wedge e_1 \\ & + (a_1 b_2 - a_2 b_1) e_1 \wedge e_2, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} = & (a_1 b_2 c_3 + a_2 b_3 c_1 + a_3 b_1 c_2 - a_3 b_2 c_1 \\ & - a_2 b_1 c_3 - a_1 b_3 c_2) e_1 \wedge e_2 \wedge e_3 \end{aligned} \quad (9)$$

そして, 次の関係が成り立つ

$$(\mathbf{a} \wedge \mathbf{b})^* = \mathbf{a} \times \mathbf{b} \quad (\text{ベクトル積}), \quad (10)$$

$$(\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c})^* = |\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}| \quad (\text{スカラ三重積}) \quad (11)$$

7 クリフォード代数系

実数と記号 e_1, e_2, e_3 からなる代数系を考え, 積 (「幾何学積」または「クリフォード積」と呼ぶ) を次のように約束する.

$$e_i^2 = e_2^2 = e_3^2 = 1, \quad e_i e_j = -e_j e_i, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (12)$$

各元は次の形の形式和 (「多重ベクトル」と呼ぶ) となる.

$$\begin{aligned} \mathcal{C} = & \underbrace{\alpha}_{\text{スカラ部}} + \underbrace{a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3}_{\text{ベクトル部}} \\ & + \underbrace{b_1 e_2 e_3 + b_2 e_3 e_1 + b_3 e_1 e_2}_{\text{二重ベクトル部}} + \underbrace{c e_1 e_2 e_3}_{\text{三重ベクトル部}} \end{aligned} \quad (13)$$

このような多重ベクトルから成る代数系を「クリフォード代数系」と呼ぶ。ベクトル空間とみると、8個の元 $1, e_i, e_i e_j, e_i e_j e_k, i, j = 1, 2, 3$ を基底とする8次元空間となる。

次のような奇数個の基底をもつ元を「奇多重ベクトル」と呼ぶ。

$$A = \underbrace{a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3}_{\text{ベクトル部}} + \underbrace{c e_1 e_2 e_3}_{\text{三重ベクトル部}} \quad (14)$$

次のような偶数個の基底をもつ元を「偶多重ベクトル」と呼ぶ。

$$B = \underbrace{\alpha}_{\text{スカラー部}} + \underbrace{b_1 e_2 e_3 + b_2 e_3 e_1 + b_3 e_1 e_2}_{\text{二重ベクトル部}}$$

そして、次のように「奇偶性」(pariy) が保たれる。

- (奇多重ベクトル)(奇多重ベクトル)
= (偶多重ベクトル).
- (偶多重ベクトル)(偶多重ベクトル)
= (偶重ベクトル).
- (奇多重ベクトル)(偶多重ベクトル)
= (奇多重ベクトル).

したがって、偶多重ベクトルの集合はそれ自身で閉じた「部分代数系」を作るこの部分代数系はハミルトン代数系にほかならない。なぜなら

$$i \equiv -e_2 e_3, \quad j \equiv -e_3 e_1, \quad k \equiv -e_1 e_2 \quad (15)$$

と置くと式(1)が満たされるからである。すなわち、クリフォード代数系はハミルトン代数系を内包している。

8 幾何学積の性質

ベクトル $\mathbf{a} = a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3$, $\mathbf{b} = b_1 e_1 + b_2 e_2 + b_3 e_3$ をクリフォード代数系の元とみなすと、これらの幾何学積は次のようになる。

$$\mathbf{ab} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 + (a_2 b_3 - a_3 b_2) e_2 e_3 + (a_3 b_1 - a_1 b_3) e_3 e_1 + (a_1 b_2 - a_2 b_1) e_1 e_2, \quad (16)$$

$$\mathbf{ba} = b_1 a_1 + b_2 a_2 + b_3 a_3 + (b_2 a_3 - b_3 a_2) e_2 e_3 + (b_3 a_1 - b_1 a_3) e_3 e_1 + (b_1 a_2 - b_2 a_1) e_1 e_2 \quad (17)$$

外積 $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ を「反対称化」によって定義する。

$$\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} = \frac{1}{2}(\mathbf{ab} - \mathbf{ba}), \quad (18)$$

$$\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} = \frac{1}{6}(\mathbf{abc} + \mathbf{bca} + \mathbf{cab} - \mathbf{cba} - \mathbf{bac} - \mathbf{acb}). \quad (19)$$

4個以上のベクトルの外積は0と約束する。すると、グラスマン代数系の公理がすべて満たされる。すなわち、クリフォード代数系はグラスマン代数系を内包している。

ベクトル $\mathbf{a} = a_1 e_1 + a_2 e_2 + a_3 e_3$, $\mathbf{b} = b_1 e_1 + b_2 e_2 + b_3 e_3$, $\mathbf{c} = c_1 e_1 + c_2 e_2 + c_3 e_3$ に対して、外積は次のようになる。

$$\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} = (a_2 b_3 - a_3 b_2) e_2 e_3 + (a_3 b_1 - a_1 b_3) e_3 e_1 + (a_1 b_2 - a_2 b_1) e_1 e_2, \quad (20)$$

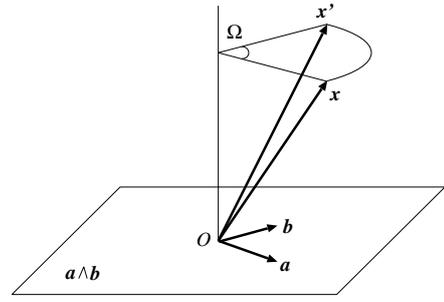


Fig. 1: 回転は回転面と回転角で指定される。

$$\mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \wedge \mathbf{c} = (a_1 b_2 c_3 + a_2 b_3 c_1 + a_3 b_1 c_2 - a_3 b_2 c_1 - a_2 b_1 c_3 - a_1 b_3 c_2) e_1 e_2 e_3 \quad (21)$$

式(16), (17)より、幾何学積の「対称化」は内積に等しい。

$$\frac{1}{2}(\mathbf{ab} + \mathbf{ba}) = a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 = \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle \quad (22)$$

特に、 $\mathbf{a}^2 = \|\mathbf{a}\|^2$ である。ゆえに、ベクトルの幾何学積は次のようにも書ける。

$$\mathbf{ab} = \langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle + \mathbf{a} \wedge \mathbf{b} \quad (23)$$

すなわち、幾何学積 \mathbf{ab} は内積 $\langle \mathbf{a}, \mathbf{b} \rangle$ と外積 $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ を同時に計算しているとみなせる。

$\mathbf{a}^2 = \|\mathbf{a}\|^2$ より、 $\mathbf{a}(\mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|^2) = (\mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|^2)\mathbf{a} = 1$ であるから、すべてのベクトル $\mathbf{a} (\neq 0)$ は逆元 $\mathbf{a}^{-1} = \mathbf{a}/\|\mathbf{a}\|^2$ をもち、 $\mathbf{aa}^{-1} = \mathbf{a}^{-1}\mathbf{a} = 1$ が成り立つ。

9 回転

回転は回転面 $\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}$ と回転角 Ω で定義される(図1)。回転面の「面積要素」を次のように定義する。

$$\mathcal{I} = \frac{\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}}{\|\mathbf{a} \wedge \mathbf{b}\|} \quad (24)$$

これは(向きを含んで)同じ回転面を定義する限り、 \mathbf{a} , \mathbf{b} の取り方によらない。定義より、 $\mathcal{I}^2 = -1$ となることが示せる。そして、ベクトル \mathbf{x} を面積要素 \mathcal{I} の面に対して角度 Ω だけ回転すると、次のベクトルとなる。

$$\mathbf{x}' = \mathcal{R}\mathbf{x}\mathcal{R}^{-1}, \quad \mathcal{R} \equiv \cos \frac{\Omega}{2} - \mathcal{I} \sin \frac{\Omega}{2} \quad (25)$$

このように作用する \mathcal{R} を「回転子」と呼ぶ。逆回転 \mathcal{R}^{-1} は Ω の符号を変える(=面積要素 \mathcal{I} の符号を変える)ことによって得られる。

10 グラスマン-ケイリー代数

実数と記号 e_0, e_1, e_2, e_3 からなる代数系を考え、積(外積)を次のように約束する。

$$e_a \wedge e_b = -e_b \wedge e_a, \quad a, b = 0, 1, 2, 3 \quad (26)$$

得られる代数系を「グラスマン-ケイリー代数」と呼ぶ。ベクトル空間とみると、16個の元 $1, e_a, e_a \wedge e_b, e_a \wedge e_b \wedge e_c, e_a \wedge e_b \wedge e_c \wedge e_d, a, b, c, d = 0, 1, 2, 3$ を基底とする16次元空間となる。

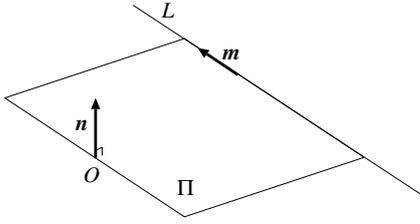


Fig. 2: 直線のプリュッカー座標の幾何学的解釈.

これによって、原点を通らない点や直線や平面がこの空間でのグラスマン代数によって表せる。まず、3次元空間の点 (x, y, z) を次の元に対応させる。

$$p = e_0 + xe_1 + ye_2 + ze_3 \quad (27)$$

ただし、これに任意の0でない実数を掛けたものも同じ点を表すとする。そのような元からなる4次元空間を「同次空間」と呼ぶ。定義より原点 $(0, 0, 0)$ は e_0 に対応するので、 e_0 を3次元空間の原点 O と同一視する。そして、 e_0 を含まない (e_0 の係数が0) の元

$$u = ue_1 + ue_2 + ue_3 \quad (28)$$

を (u, v, w) 方向を表す方向ベクトルと解釈する。これに任意の0でない実数を掛けても同じ方向を表す。これはまた式 (27) で x, y, z を無限大にした極限 (その結果 e_0 が相対的に無視される) とみなせるので、式 (28) は (u, v, w) 方向の「無限遠点」とも解釈される。

4次元同次空間を考えることは、実質的に古典的な射影幾何学を考えていることと同じである (射影幾何学では4次元同次空間は「3次元」射影空間と呼ばれる)。グラスマン-ケイリー代数は、射影幾何学をグラスマン代数によって記述したものに相当している。

3次元空間の2点を式 (27) のように同次空間の点 p_1, p_2 として表すと、二重ベクトル

$$L = p_1 \wedge p_2 \quad (29)$$

は3次元空間のその2点を通る直線とみなされる。これを基底によって

$$L = m_1e_0 \wedge e_1 + m_2e_0 \wedge e_2 + m_3e_0 \wedge e_3 + n_1e_2 \wedge e_3 + n_2e_3 \wedge e_1 + n_3e_1 \wedge e_2. \quad (30)$$

と書くとき、 $m_i, n_i, i = 1, 2, 3$ をこの直線の「プリュッカー座標」と呼ぶ。これらに任意の0でない実数を掛けても同じ直線を表すという意味で、これらは「同次座標」である。 $m = m_1e_1 + m_2e_2 + m_3e_3, n = n_1e_1 + n_2e_2 + n_3e_3$ を3次元空間のベクトルと同一視すると、 m は直線 L の方向、 n は支持平面 (その直線と原点 O を通る平面) の法線ベクトルになっている (図2)。そして、点 p が直線 L 上にある条件が

$$p \wedge L = 0 \quad (31)$$

であるという意味で、これが直線 L の「方程式」である。

3次元空間の3点を同次空間の点 p_1, p_2, p_3 で表すと、三重ベクトル

$$\Pi = p_1 \wedge p_2 \wedge p_3 \quad (32)$$

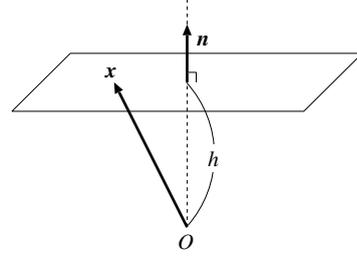


Fig. 3: 平面のプリュッカー座標の幾何学的解釈.

は3次元空間のその3点を通る平面とみなされる。これを基底によって

$$\Pi = n_1e_0 \wedge e_2 \wedge e_3 + n_2e_0 \wedge e_3 \wedge e_1 + n_3e_0 \wedge e_1 \wedge e_2 + h e_1 \wedge e_2 \wedge e_3 \quad (33)$$

と書くとき、 $n_i, i = 1, 2, 3$, および h をこの平面の「プリュッカー座標」と呼ぶ。これらも任意の0でない実数を掛けても同じ平面を表すという意味で「同次座標」である。 $n = n_1e_1 + n_2e_2 + n_3e_3$ を3次元空間のベクトルと同一視すると、これはその平面の法線ベクトルになり、 h がその平面の原点 O からの距離 (n の長さを1とする単位で測り、 n 方向を正とする) である (図3)。そして、点 p が平面 L 上にある条件が

$$p \wedge \Pi = 0 \quad (34)$$

であるという意味で、これが平面 Π の「方程式」である。

11 結合、交差と双対定理

2点 p_1, p_2 を通る直線 L をそれらの「結合」(join) と呼び、 $L = p_1 \cup p_2$ と書く。3点 p_1, p_2, p_3 を通る平面 Π をそれらの結合と呼び、 $\Pi = p_1 \cup p_2 \cup p_3$ と書く。点 p と直線 L を通る平面 Π をそれらの結合と呼び、 $\Pi = p \cup L$ と書く (図4)。

直線 L と平面 Π の交点 p をそれらの「交差」(meet) と呼び、 $p = L \cap \Pi$ と書く。2平面 Π_1, Π_2 の交線 L をそれらの交差と呼び、 $L = \Pi_1 \cap \Pi_2$ と書く。3平面 Π_1, Π_2, Π_3 の交点 p をそれらの交差と呼び、 $p = \Pi_1 \cap \Pi_2 \cap \Pi_3$ と書く (図4)。

平面 Π と点 p が互いに原点 O の反対側で向かい合つて、「逆距離」(互いの原点 O までの距離の積が1) にあるとき、それらは互いに「双対」であるといい、 $\Pi = p^*, p = \Pi^*$ と書く。

直線 L の支持平面と直線 L に直交する平面を支持平面とし、それぞれの支持平面上で互いに逆距離にある直線 L^* を L の「双対直線」という。 L^* の双対直線は L 自身である。

次のような双対定理が成り立つ。

$$(p \cup L)^* = p^* \cap L^*, \quad (L \cap \Pi)^* = L^* \cup \Pi^*,$$

$$(p_1 \cup p_2)^* = p_1^* \cap p_2^*, \quad (\Pi_1 \cap \Pi_2)^* = \Pi_1^* \cup \Pi_2^*,$$

$$(p_1 \cup p_2 \cup p_3)^* = p_1^* \cap p_2^* \cap p_3^*,$$

$$(\Pi_1 \cap \Pi_2 \cap \Pi_3)^* = \Pi_1^* \cup \Pi_2^* \cup \Pi_3^* \quad (35)$$

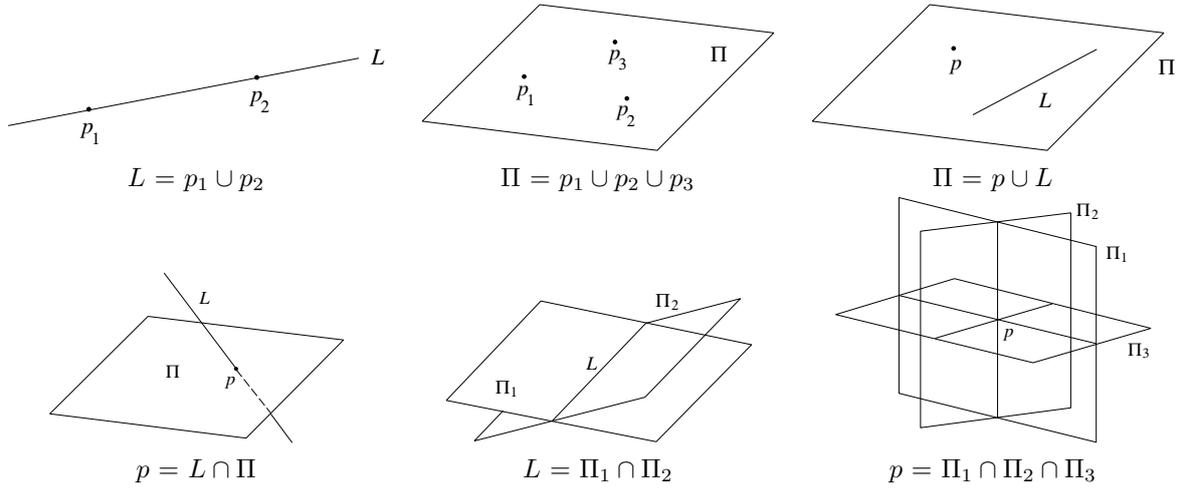


Fig. 4: 結合と交差

12 共形空間

実数と記号 $e_0, e_1, e_2, e_3, e_\infty$ からなる代数系を考えて、積（幾何学積）を次のように約束する。

$$e_1^2 = e_2^2 = e_3^2 = 1, \quad e_0^2 = e_\infty^2 = 0,$$

$$e_0 e_\infty + e_\infty e_0 = -2, \quad e_i e_0 + e_0 e_i = e_i e_\infty + e_\infty e_i = 0, \\ e_i e_j + e_j e_i = 0, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (36)$$

ベクトル空間とみると、36個の元 $1, e_\kappa, e_\kappa \wedge e_\lambda, e_\kappa \wedge e_\lambda \wedge e_\mu, e_\kappa \wedge e_\lambda \wedge e_\mu \wedge e_\nu, \kappa, \lambda, \mu, \nu = 0, 1, 2, 3, \infty$ を基底とする36次元空間となる。

1, $e_0, e_i, i = 1, 2, 3, e_\infty$ の張る5次元空間を「共形空間」(conformal space)と呼ぶ。この空間の元の外積を反対称化によって定義する。

$$x \wedge y \equiv \frac{1}{2}(xy - yx),$$

$$x \wedge y \wedge z \equiv \frac{1}{6}(xyz + yzx + zxy - zyx - yxz - xzy),$$

$$x \wedge y \wedge z \wedge w \equiv \frac{1}{24}(xyzw - yxzw + \dots),$$

$$x \wedge y \wedge z \wedge w \wedge u \equiv \frac{1}{120}(xyzwu - yxzwu + \dots) \quad (37)$$

ただし、右辺の... はすべての順列にその符号（偶順列は+、奇順列は-）を付けた和である。そして、6個以上の元の外積は0と約束する。これによってグラスマン代数の公理がすべて満たされる。

共形空間の元の内積を対称化によって定義する。

$$\langle x, y \rangle \equiv \frac{1}{2}(xy + yx) \quad (38)$$

そして、2乗ノルムを $\|x\|^2 = \langle x, x \rangle$ で定義する。しかし、式(36)より、 $\|x\|^2$ は必ずしも正とは限らない。すなわち、共形空間は非ユークリッド空間である。

3次元空間の点 (x, y, z) を共形空間の次の点に対応させる。

$$p = e_0 + \mathbf{x} + \frac{1}{2}\|\mathbf{x}\|^2 e_\infty \quad (39)$$

ただし、 $\mathbf{x} = xe_1 + ye_2 + ze_3$ であり、これを3次元空間のベクトルと同一視する。そして $\|\mathbf{x}\|^2$ はその（通

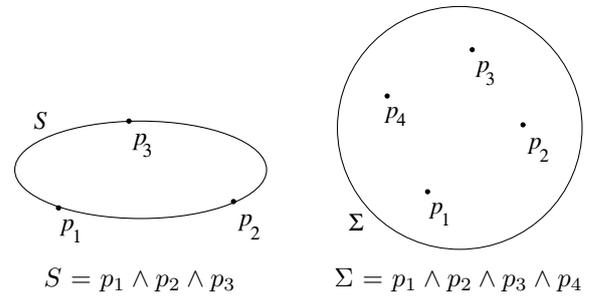


Fig. 5: 円周と球面。

常の意味の) 2乗ノルムである。式(36)の約束により、 p の共形空間の2乗ノルムは0となる ($\|p\|^2 = 0$)。式(39)に任意の0でない実数を掛けたものも同じ点を表すと約束する。すなわち、共形空間は同次空間である。

式(39)より、 $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ とすると $p = e_0$ であるから、 e_0 は3次元空間の原点 O と同一視される。一方、 $\|\mathbf{x}\|^2 \rightarrow \infty$ の極限を考えると e_0 が相対的に無視され、 p は e_∞ の定数倍となる。したがって、 e_∞ は3次元空間の（唯一の）無限遠点と解釈される。

13 円周, 球面, 直線, 平面

3点 p_1, p_2, p_3 の外積

$$S = p_1 \wedge p_2 \wedge p_3 \quad (40)$$

はこれら3点を通る円周を表す(図5)。「表す」という意味は、点 p がこの円周上にある条件が

$$p \wedge S = 0 \quad (41)$$

であるという意味であり、これが円周 S の「方程式」である。4点 p_1, p_2, p_3, p_4 の外積

$$\Sigma = p_1 \wedge p_2 \wedge p_3 \wedge p_4 \quad (42)$$

はこれら4点を通る球面を表す(図5)。「表す」という意味は、点 p がこの球面上にある条件が

$$p \wedge \Sigma = 0 \quad (43)$$

であるという意味であり、これが球面 Σ の「方程式」である。

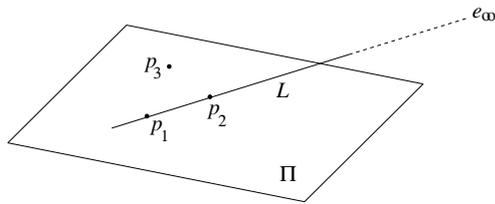


Fig. 6: 2点 p_1, p_2 を通る直線 $L = p_1 \wedge p_2 \wedge e_\infty$ は p_1, p_2 と無限遠点 e_∞ を通る円周と解釈される. 3点 p_1, p_2, p_3 を通る平面 $\Pi = p_1 \wedge p_2 \wedge p_3 \wedge e_\infty$ は p_1, p_2, p_3 と無限遠点 e_∞ を通る球面と解釈される.

式 (40) で $p_3 = e_\infty$ とした

$$L = p_1 \wedge p_2 \wedge e_\infty \quad (44)$$

は点 p_1, p_2 と無限遠点を通る円周, すなわち, 2点 p_1, p_2 を通る直線を表す (図 6). 式 (42) で $p_4 = e_\infty$ とした

$$\Pi = p_1 \wedge p_2 \wedge p_3 \wedge e_\infty \quad (45)$$

は点 p_1, p_2, p_3 と無限遠点を通る球面, すなわち, 3点 p_1, p_2, p_3 を通る平面を表す (図 6). このように, 円周と球面が基本的な幾何学的対象であり, 直線や平面は円周や球面の特別の場合とみなされる.

5次元共形空間はグラスマン-ケイリー代数の4次元同次空間に e_∞ による新たな次元を加えたものであり, グラスマン-ケイリー代数のすべての結果を含んでいる. そして, 直線, 平面, 円周, 球面の上記の表現 (「直接表現」と呼ぶ) に双対な「双対表現」を考えることができ, 結合や交差に関する次のような双対定理が成り立つ (詳細省略).

$$(\text{直接表現}) \wedge (\text{直接表現}) = (\text{結合の直接表現}),$$

$$(\text{双対表現}) \wedge (\text{双対表現}) = (\text{交差の双対表現})$$

14 共形幾何学

「共形幾何学」(conformal geometry) とは「共形変換」(conformal mapping) (角度を保つ空間の変換) の性質を調べる学問であり, 共形変換は「鏡映」と「反転」(inversion) によって生成される. 単位球に関する反転は, 単位球内の点を球の中心から逆距離の点に射影することである. 球の半径が変わればそれに応じて写像のスケールが変わる (図 7).

回転は交わる2平面に関する鏡映を合成して得られ, 2平面の交線が回転軸になる (図 8). 並進は平行な2平面に関する鏡映を合成して得られ, 回転軸が無限遠方にある回転とみなされる (図 9).

拡大・縮小は同心球面に関する反転を合成して得られる. これらによって, よく知られた恒等変換, 並進,

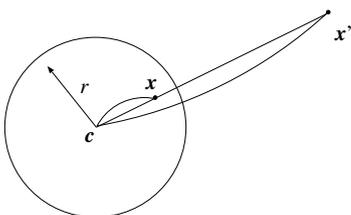


Fig. 7: 球面に関する反転.

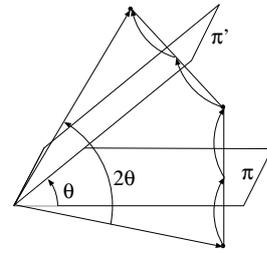


Fig. 8: 回転は交わる2平面に関する鏡映の合成として得られ, 2平面の交線が回転軸となる.

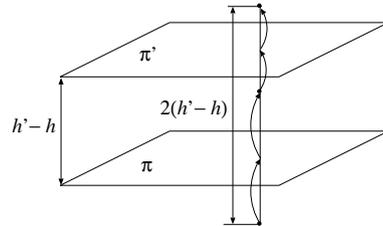


Fig. 9: 並進は平行な2平面に関する鏡映の合成として得られ, 回転軸が無限遠方にある回転とみなされる.

回転, 拡大・縮小, 相似変換, 剛体運動だけでなく, 反転を加えたすべての共形変換が生成される.

このような共形変換はすべて, 次の形の「ベクトル作用子」(verser) によって表せる.

$$\mathcal{V} = v_k v_{k-1} \cdots v_1 \quad (46)$$

ただし, 各 v_i は共形空間の元であり, k はこのベクトル作用子の「グレード」と呼ばれる. ベクトル作用子 \mathcal{V} の共役を次のように定義する.

$$\mathcal{V}^\dagger = (-1)^k v_1^{-1} v_2^{-1} \cdots v_k^{-1} \quad (47)$$

そして, ベクトル作用子 \mathcal{V} は幾何学的対象に次のように作用する.

$$\mathcal{V}(\dots)\mathcal{V}^\dagger \quad (48)$$

例えば, 回転を表す回転子 \mathcal{R} は書き変えると, やはり式 (25) の形 (グレード 2) で表される (それ以外の変換の作用子は文献^{1, 2)} 参照).

15 まとめ

幾何学的代数の利点は, 結合や交差のような幾何学的な計算が記号間の演算として簡便に記述できることである. しかし, その実行はソフトウェアツールを用いることになる. その内部では高次元 (例えば共形幾何学では 36 次元) 空間の行列計算が行われる. このとき, 要素のほとんどが 0 の疎行列が多く現れ, そのまま定義によって計算すると非常に非効率である. 現在, 幾何学的代数のソフトウェアの実行を効率化する研究が世界の各地で進行している.

参考文献

- 1) 金谷健一: 「代数系と幾何学/Geometric Algebra: ハミルトン, グラスマン, クリフォード」, 森北出版 (2014)
- 2) K. Kanatani: *Understanding Geometric Algebra: Hamilton, Grassmann, and Clifford for Computr Vision and Graphics*, CRC Press, Boca Raton, FL, U.S.A. (2015)

エイリアス状態問題に対応するための ACSM の改良 —迷路問題における相対位置テーブルを用いた内部メモリの効率的利用—

○林田 智弘 西崎 一郎 関崎 真也 武内 宏明 (広島大学)

Improvement of ACSM for the Aliased State Problems

—Efficient Utilization of the Internal Memory by Using Relative Position Table for Maze Problems—

*T. Hayashida, I. Nishizaki, S. Sekizaki and H. Takeuchi (Hiroshima University)

Abstract— This study suggests a new learning classifier system which are developed based on ACSM (Anticipatory Classifier System² with Memory) (Hayashida et al., 2014). In the suggested system, named ACSST (ACS2 with State Transition table), a state transition table which records the environmental information and relative position are introduced. POMDP (Partially Observable Markov Decision Process) is one of the Markov decision process such that an agent can observe only a part of the information of the environment. POMDPs often include multiple aliased states which the optimal actions cannot be decided based only on the current environmental information. The state transition table used for discriminate the aliased states and other sates. The experimental results which are conducted in this paper indicate that ACSST has higher performance for the large-scaled maze problems and shortest path selection problems than ACSM.

Key Words: Classifier system, Partially observable Markov decision process, Aliased states problems

1 はじめに

クラシファイアシステム (LCS: Learning Classifier System) は、生物が持っている環境への適応手段である進化と学習の概念を取り入れた自律型学習システムである。環境との相互作用を通じて、If-then の関係にある条件部と行動部によって構成されるルール (クラシファイア) をもち、各クラシファイアはその有用性を表す適合度を通して学習していく。また、クラシファイアの条件部は、ドント・ケアと呼ばれる任意の入力に合致する要素 \ddagger が導入されており、より簡単に単純なルールを学習することができる。クラシファイアシステムは自律ロボット工学^{3, 16)}、分類問題やデータマイニング^{20, 14, 10)} など様々な分野で応用されている。

Holland^{6, 7)} が考案した Cognitive System⁸⁾ がクラシファイアシステムの最初の枠組みであると考えられ、その後様々なクラシファイアシステムが提案されてきた^{4, 18, 19)}。

数あるクラシファイアシステムの中でも、XCS (eXtended Classifier System)¹⁹⁾ は多くの注目を集め、最も成功したクラシファイアの一つといえる。XCS が提案されるまでは ZCS (Zeroth-level Classifier System)¹⁸⁾ などで用いられているように、期待利得もしくは強度からクラシファイアの適合度を計算していたが、適切な解を得るために必要であるが期待利得が低いクラシファイアは淘汰されるという問題点があった。この問題点を解消するために、XCS ではクラシファイアが予測した利得と実際の利得の誤差から計算したクラシファイアの正確さを適合度としている。XCS における利得は、Holland のバケツリレーアルゴリズム⁹⁾ に従って計算されており、逐次学習問題においては報酬の得られない状態への推移を指示するクラシファイアであっても、最終的に得られた報酬から割引係数のかかった報酬が得られる。しかし、これらの手法では POMDP の問題に対応することは困難であった。ACS (Anticipatory Classifier System)^{1, 15)} は、従来の ZCS や XCS が過去の情報を参照するのに対して、未来の情報を参照す

る手法であった。この手法は、IF-THEN の条件部、行動部に未来の情報を予測した EFFECT 部を加えることにより、エイリアス状態を解決しようと考えた。ACS の遺伝的アルゴリズムを改良した ACS2²⁾ は、現在の期の環境に関する情報のみによって行動を決定するために、この知覚情報のみでは状態を識別できないエイリアス状態を含む POMDP の問題に対しては、適切な行動を選択することが困難であった。このような問題を、本研究ではエイリアス問題と呼ぶ。

エイリアス問題に対して、内部メモリを導入した LCS がいくつか提案されている。XCS に基づくシステムとして、XCSM (XCS with Memory)¹¹⁾ や、その拡張としての XCSMH (XCSM Hierarchic)¹²⁾、エイリアス状態におけるクラシファイアの利得振動を用いてエイリアス状態の判別を行う XCSAT (XCS with internal Action Table)¹³⁾ が提案されている。また、XCSAT と同様のエイリアス状態識別の機構と内部メモリを導入した ACSM (Anticipatory Classifier System with Memory)⁵⁾ が提案されている。

エイリアス状態判別機構を導入したこれらのクラシファイアシステム野中では、ACSM が高いパフォーマンスを持つが、学習過程におけるクラシファイアの利得振動を用いたエイリアス状態の判定を行うため多くの学習期間が必要であることと、エイリアス状態の誤判別による学習効率の低下が問題である。本研究では、ACS2²⁾ に学習過程で得られる相対位置を記憶した状態遷移テーブルを導入することで、エイリアス状態を識別し POMDP にも対応するクラシファイアシステムを提案する。このシステムは ACSM⁵⁾ を改良したクラシファイアシステムであり、エイリアス状態を識別する状態遷移テーブルによって特徴づけられているため ACSST (ACS2 with State Transition table) と呼ぶ。提案手法を POMDP 環境が存在する迷路問題に適用し、従来の研究と比較することにより性能を検証する提案手法を POMDP が存在する迷路問題に適用し、従来の研究と比較することにより性能を検証する。

2 クラシファイアシステム

あらゆる行動系は IF-THEN ルールの集合によって表現できるため、この性質を利用した行動選択のためのシステムがクラシファイアシステムであり、この IF-THEN ルールの全体集合が進化的に学習される。クラシファイアシステムに基づくエージェントは、環境からの外部情報を取得し、保持するクラシファイアによって行動を決定する。クラシファイアシステムは行動選択や学習の特徴などにより ZCS, XCS, ACS などに分類される。

2.1 ACS2

ACS2 は、各クラシファイアが条件部、行動部、効果部から構成され、効果部は行動の結果としての環境変化を予測し、正しい場合はそのクラシファイアの予測精度を増加させ、誤っている場合は減少させる。ACS2 では、各クラシファイアの予測精度と評価値の積に基づいて行動が選択される。

ACS2^{2, 2)}において、クラシファイア cl_i は、Fig. 1 に示されるように、条件部 $cl_i.C$ 、行動部 $cl_i.A$ 、効果部 $cl_i.E$ から構成され、予測利得 $cl_i.r$ 、予測精度 $cl_i.q$ を保持する。

条件部	行動部	効果部	予測利得	予測精度
$cl_i.C$	$cl_i.A$	$cl_i.E$	$cl_i.r$	$cl_i.q$

Fig. 1: A classifier cl_i

条件部 $cl_i.C$ がエージェントが知覚した環境情報に一致する場合に発火するという。行動部 $cl_i.A$ はクラシファイアの出力であり、エージェントの行動が記述される。また、効果部 $cl_i.E$ はクラシファイアの行動による環境の変化を表し、予測利得 $cl_i.r$ は環境からの報酬あるいは利得の予測値であり、予測精度 $cl_i.q$ は効果部の精度を表す。ACS2 のおおまかな枠組みを Fig. 2 に示す。

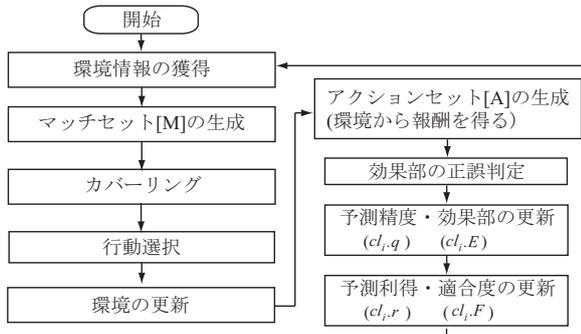


Fig. 2: Flowchart of ACS2

エージェントの知覚情報に対して発火したクラシファイアの集合をマッチセット $[M]$ とし、 $cl_i.F = cl_i.r \times cl_i.q$ をクラシファイア cl_i の適合度として、 $[M]$ の中から $cl_i.F$ に基づいて ϵ -greedy により 1 つのクラシファイアが選択される。すなわち、確率 $1-\epsilon$ で $[M]$ から $cl_i.F$ が最大のクラシファイアが 1 つ選択され、確率 ϵ で $[M]$ から 1 つのクラシファイアがランダムに選択される。このとき、エージェントは選択されたクラシファイア cl_i の行動部 $cl_i.A$ により定義された行動を選択する。 $[M]$ の中で、 $cl_i.A$ と同じ行動部を持つクラシファイアの集

合をアクションセット $[A]$ とする。

2.1.1 クラシファイアの進化

クラシファイア $cl_i \in [A]$ に対して、獲得利得 ρ に基づいて予測精度 $cl_i.q$ 、予測利得 $cl_i.r$ 、適合度 $cl_i.F$ などのパラメータが更新され、 $cl_i.F$ に基づき、再生、一点交叉、突然変異からなる遺伝的アルゴリズム (GA) により条件部 $cl_i.C$ の更新が行われる。ここでは、パラメータ更新により各ルールによって構成される方策の学習、GA によりルールの条件部の探索が行われている。

2.1.2 パラメータ更新

アクションセット $[A]$ に含まれるクラシファイアの行動部は共通しており、エージェントは、行動の結果として変化した環境情報を再度知覚する。各クラシファイアの効果部は環境変化の予測であり、Fig. 2 に示されるように知覚情報と各クラシファイアの効果部を比較することで正誤判定を行い、 $\beta \in (0, 1]$ を学習率として、予測精度が次式により更新される。

$$cl_i.q \leftarrow \begin{cases} \beta + (1 - \beta)cl_i.q & \text{if correct} \\ (1 - \beta)cl_i.q & \text{otherwise} \end{cases} \quad (1)$$

このとき、 $[A]$ に含まれるクラシファイアの効果部は、知覚された環境変化に基づいて更新される。次に、予測利得および適合度を更新する。

$$cl_i.r \leftarrow cl_i.r + \beta(\rho + \gamma \max P - cl_i.r) \quad (2)$$

$$cl_i.F \leftarrow cl_i.q \times cl_i.r \quad (3)$$

ただし、 ρ は環境からの報酬あるいは獲得利得であり、 $\gamma \in (0, 1]$ は割引率、 $\max P$ は行動の結果として変化した環境に対して発火するクラシファイアの予測利得 $cl_i.r$ の最大値である。式 (2) より、ACS2 におけるクラシファイアの予測利得 $cl_i.r$ は、Q-learning¹⁷⁾ の行動価値関数と同様の方法で更新される。

2.1.3 カバーリング

マッチセットのクラシファイアの数がある一定以下の場合、新しいクラシファイアが生成される。この動作はカバーリングと呼ばれ、カバーリングが行われることでマッチセットのクラシファイアの数がある一定以上となり、多様な行動ルールの探索ができる。カバーリングでは、現在の入力情報に一致する条件部と、ランダムに生成された行動部、効果部、予測利得および予測精度を持つ複数のクラシファイアが新たにマッチセットに追加される。また、カバーリングを行うことでクラシファイア群の数がある一定数を超える場合、適合度の低いクラシファイアを削除することで、クラシファイア群全体の数が一定以下となるように調整する。

2.2 エイリアス状態

ACS2 は、現在の期の環境に関する情報のみによって最適方策を獲得することができる環境であるマルコフ環境には対応しているが、現在の期の情報のみによって最適方策を獲得することができない POMDP 環境の問題への対応は非常に困難である。

エージェントが知覚する外部情報は同じであるが最適方策が異なるようなセルにエージェントがいることをエイリアス状態といい、エイリアス状態は現在の期

の状態を知覚するだけでは最適方策を獲得できない原因となっている。つまりエージェントが得られる外部情報が限定されているため、現在の期の情報のみでは最適方策を獲得することができず、このような環境は POMDP 環境の一種である。

3 相対位置テーブルを持つ ACS2

本研究で提案する状態遷移テーブルをもつ ACS2 (ACSST: ACS2 with State Transition table) は、ACS2 に状態遷移テーブルを導入することにより、POMDP におけるエイリアス状態に効率的に対応している。ACSST は、各状態からゴールまでの相対位置を取得する事前学習と本学習から構成される。

事前学習の目的は、初期状態から終端状態までの各クラシファイアのゴールからの相対位置を取得することである。行動選択にはランダム行動選択を用いる。ランダムに決定された迷路問題のスタート地点の座標を (0, 0) とし、スタート地点に対する通過した通路の座標とエージェントの近く情報を記録する。エージェントがゴールに到着した場合、今まで記録した通路に対応するゴールからの相対座標を計算し、記録する。スタートからゴールまでを 1 エピソードとし規定回数に達するまで行う。

3.1 ACSST の本学習

ACSST では、知覚した環境情報に対応する外部環境と複数の相対位置の組み合わせが状態遷移テーブルに含まれる場合、対応する状態をエイリアス状態と判断し、エージェントは環境と相対位置の組み合わせが 1 つに限定されるまでランダムに行動する。相対位置が獲得されると、相対位置の情報を利用し、環境と相対位置が一致するクラシファイアをマッチセットとして選択する。 ϵ -greedy 手法を用いてマッチセットの中の適合度に基づくクラシファイアの行動部を外部行動として採用する。なお行動選択には、予測利得と予測精度の積を適合度とする。マッチセットのうち選択された外部行動を持つクラシファイアをアクションセットと呼び、アクションセットのクラシファイアの条件部に対して GA を適用する。また、式 (1)–(3) を用いて予測精度、予測利得の更新を行う。エージェントがゴールに到着するまで繰り返し、スタートからゴールまでを 1 エピソードとする。

3.2 ACSST における事前学習の改良

上述の通り、ACSST では、知覚した環境情報に対応する外部環境と複数の相対位置の組み合わせが状態遷移テーブルに記録されている場合、対応する状態をエイリアス状態と判断する。しかし、状態遷移テーブルを獲得する事前学習では、エージェントがランダムに行動を選択するが、大規模で複雑な迷路問題に対応することが困難であることがある。本論文では、深さ優先探索に基づく行動選択により、効率的かつ網羅的な ACSST における事前学習を行う手法として提案する。ACSSTr における事前学習の行動選択アルゴリズムについて、以下に述べる。

手順 1 エージェントは周囲 8 セルの外部情報を知覚し、未訪問である通路を調べる。周囲 8 セルにゴールが存在すれば手順 3 に進む。

手順 2 周囲 8 セルに未訪問な通路が存在する場合、未訪問な通路に行動選択を行い手順 1 に戻る。周囲 8 セルに未訪問な通路がない場合、未訪問な通路が存在する通路まで戻り、手順 1 に戻る。

手順 3 エージェントはゴールに到着し、事前学習での 1 エピソードを終了する。

ランダムな行動選択を行う場合を ACSST、深さ優先探索による行動選択を行う場合を ACSSTr として、これら 2 つのシステムと ACSM⁵⁾ をいくつかのベンチマーク問題に適用した数値実験を実施し、提案手法の有効性の検証および事前学習の改善の効果を検討する。

4 数値実験

本研究では、POMDP に対するベンチマーク問題として用いられている迷路問題および最短経路問題を用いて、提案手法の性能を検証するための実験を実施する。本実験におけるパラメータは、従来研究での数値実験^{13, 5)}と同様に、Table 1 のように設定している。

Table 1: Parameter settings for the experiments

Reward for achieving the Goal	100
Learning rate	$\beta = 0.2$
Discount rate	$\gamma = 0.71$
Crossover probability	0.75
Mutation probability	0.025

4.1 迷路問題を用いた性能検証実験

ここでは、Fig. 3 に示される 5 種類の迷路問題を用いて実験を行う。

Fig. 3 に示される迷路問題では、エージェントはセル間を移動する。エージェントは自分が位置するセルの周囲 8 セル (上下左右および斜め 4 セル) が、それぞれ壁、通路、ゴールのいずれかであることを認識して、最小ステップ数で [G] (ゴールセル) に到達することを目的とする。Fig. 3 では、白あるいは薄いグレーのセルは通路を示し、濃いグレーのセルは壁を示す。(a) woods101, (b) maze7 では、薄いグレーのセルはエイリアス状態を意味し、エージェントは [G] を含めたすべてのセルからランダムに選択されたセルからスタートする。また、(c) Lab1, (e) Nevison-maze では、[S] (スタートセル) から、(d) Lab1-alias では [S'] からランダムに選択された 1 つのセルからスタートする。それぞれの迷路問題の特徴を Table 2 に示す。

事前学習を 50 エピソード、ACSST の学習を 6000 エピソード、さらに学習なしで 200 エピソード実行しそれを試行期間とする。30 試行での試行期間での平均値を実験結果とする。提案手法と ACSST の他に ACSM⁵⁾ をエイリアス状態の含まれる最短経路問題に適用した数値実験を行う。試用期間におけるゴールまでのステップ数の平均値 (mean)、最良値 (best)、最悪値 (worst)、1 試行あたりの事前学習も含めた実行時間 (time) の 30 試行の平均値を Table 3 に示す。

Table 3 より、(a) woods101, (b) maze7 などの小規模な迷路問題では ACSM が最も高いパフォーマンスを持つことがわかる。(c) Lab1 や (e) Nevison-maze などの大規模な迷路問題では ACSM では 30 試行のうち学習に失敗してゴールに到達するためのルールが獲得で

Table 2: Summary of the maze problems

	総セル数	通路セル数	エイリアス状態数
(a) woods101	11	11	4
(b) maze7	10	10	2
(c) Lab1 / (d) Lab1-aliased	144(12 × 12)	79	35
(e) Nevison-Maze	900(30 × 30)	505	473

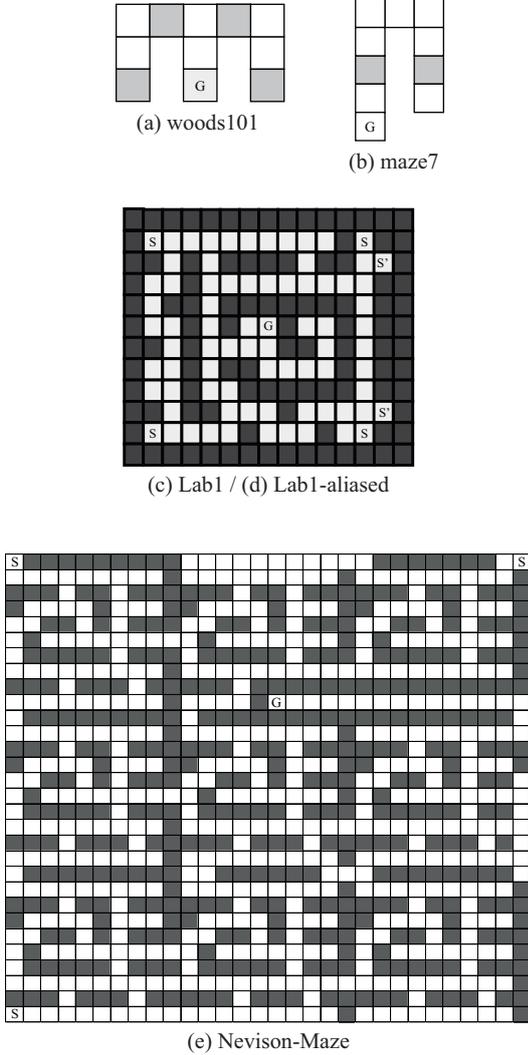


Fig. 3: Maze problems

きない試行もあった。一方で、提案手法である ACSST や ACSSTr ではすべての試行で、適切なルールの獲得に成功している。ACSST および ACSSTr の実行時間については、ACSM と比較して 20 分の 1 程度まで短縮することに成功しており、効率的なルール獲得ができていけると言える。また、(d)Lab1-aliased の 2 つのスタートセル [S] はエイリアス状態である。Table 3 より、ACSM ではスタート地点がエイリアス状態の場合には適切なルールの学習が難しいことがわかる。ACSST, ACSSTr では、スタート地点がエイリアス状態である場合、エージェントはエイリアス状態でないセルに到達するまで行動ルールを用いずにランダムに行動選択するため、これらの迷路問題ではエイリアス状態を抜け出すことに成功している。Table 3 より、エイリアス状態ではないセルに到達することができれば、ゴール

Table 3: Results (maze problems)

	ACSSTr	ACSST	ACSM ⁵⁾	Ave. of shortest steps
(a) woods101				
mean	2.96	2.96	2.73	2.45
best	2.83	2.88	2.60	
worst	3.08	3.06	2.87	
time	1.15	1.16	46.13	
(b) maze7				
mean	4.31	4.34	4.13	3.70
best	4.05	4.09	3.80	
worst	4.49	4.47	4.86	
time	1.72	1.73	72.20	
(c) Lab1				
success	30	30	24	14.50
mean	14.49	14.52	19.84	
best	14.26	14.36	15.09	
worst	14.81	14.71	55.26	
time	22.75	23.78	3202.63	
(d) Lab1-aliased				
success	30	30	0	15.17
mean	15.26	15.29	—	
best	15.05	15.08	—	
worst	15.54	15.55	—	
time	23.26	24.64	—	
(e) Nevison-maze				
success	30	30	13	45.33
mean	45.26	45.54	142.84	
best	44.65	44.54	58.72	
worst	46.79	46.85	298.38	
time	1578	1613	27778	

までの最短経路を選択するようなルールの獲得は容易であることもわかる。

なお、本研究では 1 試行の最終 200 エピソードの結果を実験結果として取り扱っており、各エピソードのスタートセルはランダムに決定される。このため、スタートセルに偏りが生じ、ゴールまでの最短ステップ数が比較的短いスタートセルが多く選択された場合、Table 3 に示されるように平均最短ステップ数よりも短いステップでゴールに到達している試行が存在することも考えられる。これは、提案手法により、それぞれの迷路問題において最短ステップ数でゴールに到達するための、最適な行動ルールを獲得していることを意味する。

4.2 最短経路問題を用いた性能検証実験

ここでは、Fig. 4 に示される最短経路問題 (環境 1-3) を用いて実験を行う。

環境 1-3 の特徴については、Table 4 に示される。

Table 4: Summary of shortest path problems

	Number of			
	grids	corridors	walls	aliased stat.
env.1	15 × 42	400	230	392
env.2	36 × 36	893	403	861
env.3	50 × 31	965	585	939

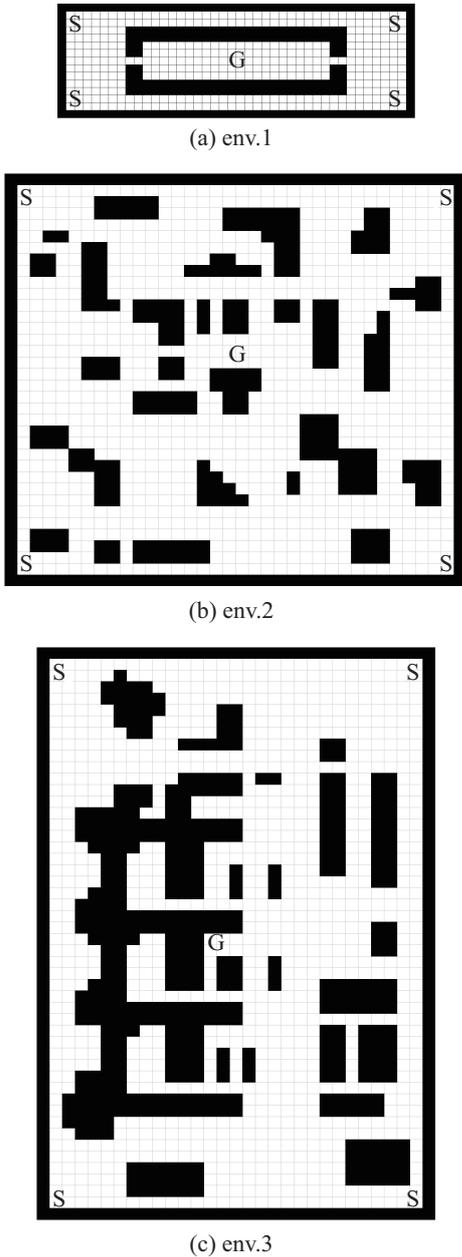


Fig. 4: Shortest path problems

事前学習を 60 エピソード, ACSST の学習を 50000 エピソード (環境 1 は 30000 エピソード), さらに学習なしで 200 エピソード実行し, それを試行期間とする. 30 試行での試行期間での平均値を実験結果とする. 前節と同様に, 提案手法と ACSST の他に ACSM⁵⁾ をエイリアス状態の含まれる最短経路問題に適用した数値実験を行う. 試行期間におけるゴールまでのステップ数の平均値 (mean), 最良値 (best), 最悪値 (worst), 1 試行あたりの実行時間 (time) の平均値を Table 5 に示す.

Table 5 より, 3 つの環境を用いた場合すべてにおいて提案手法は従来研究と同等のパフォーマンスを持ち, 実行時間が最短である. 従来研究では大規模な問題での事前学習における網羅的な通路の探索は難しかったが, 提案手法で利用した行動選択により効率的な状態遷移テーブルの獲得を可能とし, 計算時間が短縮されたと考えられる.

Table 5: Results (shortest path problems)

	ACSSTr	ACSST	ACSM ⁵⁾	Ave. of shortest steps
env. 1				
success	30	30	0	19.5
mean	32.44	32.70	—	
best	30.08	29.87	—	
worst	37.76	37.62	—	
time	693.5	696.3	—	
env. 2				
success	30	30	0	21.5
mean	35.92	34.92	—	
best	32.22	32.32	—	
worst	39.32	42.16	—	
time	3154	3185	—	
env. 3				
success	30	30	0	28.5
mean	37.45	34.92	—	
best	33.93	44.23	—	
worst	41.56	44.23	—	
time	4845	4877	—	

ACSSTr では, 3 種類の問題において従来研究と同等のパフォーマンスを持ち, 実行時間を短縮されている. ACSST では, 事前学習にランダム行動選択を用いるため, 大規模な最短経路問題での事前学習で網羅的に通路を探索が困難であり, システムのパフォーマンスに大きく影響していたが, 提案手法で事前学習における行動選択を改良したで, 網羅的な探索を行い, 効率的に状態遷移テーブルを獲得することが可能となった. これにより状態遷移テーブルを効果的に利用することができ, 1 試行あたりの計算時間が短縮されたと考えられる.

5 まとめと今後の課題

本研究では, ACSST の初期探索を改良し, 従来のシステムに比べ高いパフォーマンスを得ることができた. ACSSTr を最短経路問題に適用することで, 従来研究では初期探索が困難であった大規模で複雑な問題に対して, 事前学習における行動選択を改善することで効率的かつ網羅的な初期探索を行えることを示した. 今後の課題として, より大規模な迷路問題の場合や, スタート地点が限定される場合などに, 迷路問題全体の網羅的な探索が困難であると考えられる. そのため, 初期探索の行動選択アルゴリズムを改良する必要がある. また, 提案手法の性能を検証するため, より大規模な最短経路問題や現実的な POMDP 環境への適用も行う必要があると考えられる.

参考文献

- 1) V. Butz: *Anticipatory Learning Classifier Systems*, Kluwer Academic Publishers, (2002).
- 2) V. Butz, W. Stolzmann and D. Ag: "An algorithmic description of ACS2," *Lecture Notes in Computer Science* **2321**, 361–390, (2002).
- 3) M. Dorigo and M. Colombetti: *Robot shaping: an experiment in behavior engineering*, MIT Press/Bradford Books, Massachusetts, (1998).
- 4) K.D. Jong: "Learning with genetic algorithms: an overview," P.Langley(ed.), *Machine Learning* **3**, Kluwer Academic, Massachusetts, 121–138, (1988).
- 5) 林田 智弘, 西崎 一郎, 酒戸 亮典: "エイリアス状態を含む部分可観測マルコフ決定過程のための内部メモリを用いた ACS の開発," 電子情報通信学会論文誌 A **J97-A**, 593–603, (2014).

- 6) J. H. Holland: "Adaptation in natural and artificial systems," *University of Michigan Press*, Michigan, (1975).
- 7) J.H. Holland: "Adaptation," R. Rosen, F.M. Snell, (eds.), *Progress in Theoretical Biology* **4**, Academic Press, New York, 263–293, (1976).
- 8) J.H. Holland and J.S. Reitman: "Cognitive systems based on adaptive algorithms," *ACM SIGART Bulletin* **63**, ACM, New York, 49–49, (1977).
- 9) J.H. Holland: "Properties of the Bucket Brigade," J. J. Grefenstette (ed.), *Proceedings of the 1st International Conference on Genetic Algorithms*, L. Erlbaum Associates, New Jersey, 1–7, (1985).
- 10) J.H. Holmes and J.A. Sager: "Rule discovery in epidemiologic surveillance data using EpiXCS: an evolutionary computation approach," J. G. Carbonell, J.Siekmann (eds.), *Artificial Intelligence In Medicine*, Springer-Verlag, London, 444–452, (2005).
- 11) P.L. Lanzi: "Adaptive agents with reinforcement learning and internal memory," J. A. Meyer, A. Berthoz, D. Floreano, H. Roitblat, S. W. Wilson(eds.), *From Animals to Animats 6, Proceedings of the Sixth International Conference on Simulation of Adaptive Behavior*, MIT Press, Cambridge, 333–342, (2000).
- 12) P.L. Lanzi, S.W. Wilson: "Toward optimal classifier system performance in non-Markov environments," *Evolutionary Computation* **8**, 393–418, (2000).
- 13) 西崎 一郎, 林田 智弘, 森分 啓太: "POMDP のための内部行動テーブルをもつクラシファイアシステムの開発," *電子情報通信学会論文誌 A* **J94-A**, 982–990, (2011).
- 14) S. Saxon and A. Barry: "A XCS and the Monk's problems," P. L. Lanzi, W. Stolzmann, S. W. Wilson (eds.), *Learning Classifier Systems From Foundations to Applications*, Springer-Verlag, London, 223–242, (2000).
- 15) W. Stolzmann: "An introduction to Anticipatory Classifier Systems," P. L. Lanzi, W. Stolzmann, S. W. Wilson (eds.), *Learning Classifier Systems From Foundations to Applications*, Springer-Verlag, London, 175–194, (2000).
- 16) W. Stolzmann and M. V. Butz: "Latent learning and action planning in robots with anticipatory classifier systems," P.L. Lanzi, W. Stolzmann and S.W. Wilson (eds.), *Learning Classifier Systems From Foundations to Applications*, Springer-Verlag, London, 301–320, (2000).
- 17) C.J.H. Watkins and P. Dayan: "Q-learning," *Machine Learning* **8**, 55–68, (1992).
- 18) S.W. Wilson: "ZCS: a zeroth level classifier system," *Evolutionary Computation* **2**, 1–18, (1994).
- 19) S.W. Wilson: "Classifier fitness based on accuracy," *Evolutionary Computation* **3**, 149–175, (1995).
- 20) S.W. Wilson: "Mining oblique data with XCS," P. L. Lanzi, W. Stolzmann, S. W. Wilson (eds.), *IWLCS '00 Revised Papers from the Third International Workshop on Advances in Learning Classifier Systems*, Springer-Verlag, London, 158–176, (2000).

密度に基づく空間クラスタリングを用いた ジオソーシャル画像からのトピック抽出

○酒井達弘 田村慶一 (広島市立大学)

Extracting Topics in Geo-Social Images using Density-based Spatial Clustering

*T. Sakai and K. Tamura (Hiroshima City University)

Abstract— In this study, we focus on a multimodal spatial clustering method for extracting areas of interest (AOIs) in geo-social images such as geo-tagged tweets with photos. The geo-social images include not only personal topics, but also local topics and events; therefore, a local topic and event extraction method for geo-social images is a very attractive research topic in many different application domains. To extract AOIs in geo-social images, we propose a new method for local topic extraction based on a density-based multimodal spatial clustering algorithm called the (ϵ, σ) -density-based multimodal spatial clustering. The (ϵ, σ) -density-based multimodal spatial clustering algorithm can extract multimodal spatial clusters that are spatially and semantically separated from other spatial clusters. Moreover, to present the main topics of each multimodal spatial cluster, representative geo-social images are detected using network-based importance analysis. To evaluate our new local topic extraction method, we conducted experiments using actual geo-tagged tweets that include photos. The experimental results show that our method can extract AOIs as multimodal spatial clusters.

Key Words: Local topic extraction, Geo-social image, Multimodal spatial clustering, Deep learning

1 はじめに

ビッグデータへの関心の高まりとともに、ソーシャルメディア上に投稿される画像データから有用な知識を取り出す研究が盛んに行われている¹⁾。例えば、写真共有サイトである Flickr に投稿される観光関連の写真(画像データ)について、写真に付けられたコメント(テキストデータ)を用いてユーザの関心が高い観光スポットを取り出す研究が行われている²⁾。また、近年、GPS 付きスマートフォンの普及と GPS に連動したアプリケーションが利用できる環境が整うとともに、位置情報付きの画像データがソーシャルメディア上に投稿されるようになっており、新しい空間情報としてその利活用が期待されている³⁾。

本研究では、ソーシャルメディア上に日々投稿される画像データについて、位置情報と画像の内容を記載したテキストを持つデータを、ジオソーシャル画像と呼び、密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法を用いて、ジオソーシャル画像データから各地域のトピックを抽出する手法を提案する。また、ジオソーシャル画像データとして、本研究では Twitter に投稿されるジオタグ付きのツイートで画像データが付与されているツイートに着目する。Twitter に投稿されるジオソーシャル画像データは、個人的な趣味や話題だけでなく、ユーザが各地域で日々目にした事象・話題を含んでおり、各地域のトピックを抽出することができれば、観光情報、マーケティングや動向分析に活用することができる。

内容が類似したジオソーシャル画像データが多数投稿される地域はユーザの関心の高いトピックが存在すると考えられる。そこで、提案手法では、最初に、密度に基づく空間マルチモーダルクラスタリング手法を用いて、空間的また内容的にも類似したジオソーシャル画像データが密に投稿されている注目領域をマルチモーダル空間クラスタとして抽出する。次に、マルチモーダル空間クラスタに含まれるトピックを自動的に

抽出し、可視化するために、マルチモーダル空間クラスタ中に含まれるジオソーシャル画像データ集合の類似度グラフからネットワークベースの重要度算出手法を用いて、代表画像データを特定する。

密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法は、密度に基づく空間クラスタリング手法⁴⁾の拡張であり、各地域において投稿数の差異があること、つまり、都市部と郊外とでは投稿数が異なることを考慮し、空間クラスタの抽出基準を変化させている。また、ジオソーシャル画像データの類似度は、テキストデータと画像データ間の2つを考慮する必要がある。そこで、テキストと画像データの異なる種類のデータ間の類似度としてマルチモーダル類似度を定めた。

マルチモーダル類似度はテキストデータの類似度と画像データの類似度のトレードオフとなっている。テキストデータは、テキストデータに含まれる語句集合のコサイン類似度を用いる。画像データは深層学習を使用してコサイン類似度を求める。具体的には、オートエンコーダ(自己符号化器)⁵⁾を多層にした Stacked Denoising Autoencoders(SdA)⁶⁾、RBM (Restricted Boltzmann Machine)⁷⁾を多層にした DBN (Deep Belief Network)⁸⁾で取り出した特徴ベクトルを用いて算出を行う。

Twitter 上に投稿される画像データを含むジオタグ付きツイートをを用いて実際に評価実験を行ったところ、各地域のトピックを取り出すことできた。また、空間クラスタを代表画像データを用いて可視化することで、空間クラスタが持つトピックが分かりやすくなることも確認することができた。

本論文の構成は以下の通りである。第2章では、関連研究を述べる。第3章では、データ構造と提案手法の全体の処理手順を示す。第4章では、密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法について述べる。第5章では、ネットワークベースの重要度算出手法について説明する。第6章では、評価実験の実験結

果を示し、第7章で本論文をまとめる。

2 関連研究

近年、インターネット上のユーザはソーシャルメディアサイト上に、携帯電話やスマートフォンで撮影した地域の話題やイベントの写真を画像データとして投稿し、情報発信を盛んに行うようになってきている。Flickrのような写真共有サイトやTwitter上に投稿された写真は、個人的な趣味だけでなく社会的なトピックを含んでいるため、分析対象として注目を集めている。インターネット上のユーザは、投稿される画像データを通して各地域の話題を収集し、また、情報発信のツールとして活用されている。このように、インターネット上に投稿される写真はジオソーシャル画像データとして大切な情報源として扱われるようになってきているため、ジオソーシャル画像データに対するデータマイニング技術の確立は重要な研究課題のひとつとなっている。

Flickr上に投稿された画像データを分析する研究がこれまでに盛んに行われている。Jaffeら⁹⁾は、Flickr上に投稿されたジオタグ付き画像データをクラスタリングする手法を提案している。場所情報を用いて階層的に画像データをクラスタリングし、ホットスポットの検出を行っている。また、Rattenburyら²⁾は、Flickr上に投稿される画像データからイベントサイトを検出する研究を行っている。タグデータを使って画像データがどのイベントであるかを推定する手法も提案している。Kennedyら¹⁰⁾は、地理的なランドマークに関連する画像データを検索するためにタグデータを用いた検索システムを提案している。Yanaiら¹¹⁾は、k-means法を使ってジオタグ付き画像データをクラスタリングする手法を提案している。このようにFlickr上における研究は多数存在するが、クラスタリング部分については、位置情報、タグや画像データのみで行われている。

提案手法は、密度に基づくクラスタリング手法を用いている。Chenら¹²⁾は、頻度の高いタグを持つ画像データを密度に基づくクラスタリング手法であるDBSCANを用いてクラスタリングし、時空間上でイベント検出する手法を提案している。Kisilevichら¹³⁾は、ジオタグ付き画像データに対してDBSCANを用いて空間クラスタを求める手法を提案している。ジオタグ付き画像データを投稿したユーザ数を密度と考え空間クラスタを抽出している。Shiraiら¹⁴⁾は、DBSCANを用いてジオタグ付き画像データからホットスポットを見つける手法を提案している。これらの研究は空間クラスタリング手法を用いているが、クラスタリングの過程では位置情報のみが使用され、データ間の類似度は考慮されていない。

我々は先行研究としてTwitter上のツイートを対象として、密度に基づくクラスタリング手法を用いてジオタグ付き文書データから各地域のトピックを抽出する手法を提案している¹⁵⁾。文献¹⁵⁾では、位置情報だけでなく、ツイートの文章内容も考慮してクラスタリングを行っている。本研究は、文献¹⁵⁾における空間クラスタリング手法のマルチモーダルデータへの自然な拡張である。文献¹⁶⁾では、Flickr上のジオタグ付き画像データを複数の領域に分割し、領域ごとにスペクトルクラスタリング手法を用いて代表画像を抽出する研

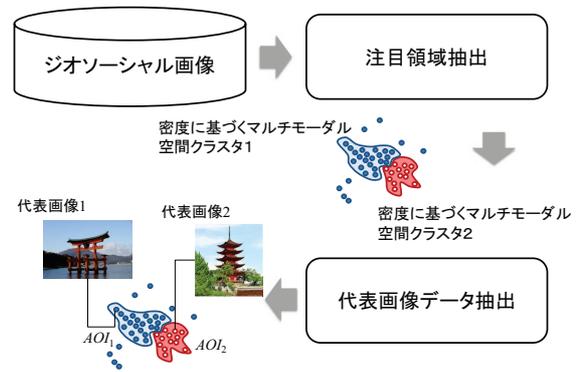


Fig. 1: Overview of the proposed method.

究が行われている。また、文献¹⁷⁾では、類似したメッセージによるトピックモデルを用いて、各トピックにおいて、グラフベースのアルゴリズムで類似した画像データを取り出す手法を示している。また、McParlaneら¹⁸⁾は、トピックに関連した画像を取り出し、ランキングする手法を提案している。

3 提案手法

本章では、ジオソーシャル画像データのデータモデルと提案手法について述べる。

3.1 データモデル

ジオソーシャル画像データは、次の5つの要素から構成される画像データである。

$$gsi_k = \langle pt_k, pl_k, user_k, text_k, image_k \rangle \quad (1)$$

ここで、 pt_k は投稿時刻、 pl_k は投稿位置（例えば、施設名や経度・緯度などのジオタグなど）、 $user_k$ はユーザ情報（例えば、ユーザのIDやプロフィールなど）、 $text_k$ は画像と同時に投稿されたテキストデータ（例えば、タイトル、コメントやタグなど）、 $image_k$ は画像データ、もしくは画像データが格納されているオンライン上のURLである。

3.2 概要

類似したジオソーシャル画像データが密に投稿されている空間上の領域はユーザの関心が高い注目領域であり、注目領域とその内容を特定することでジオソーシャル画像データ集合からトピックを抽出する。Fig. 1に提案手法の概要を示す。提案手法では、(1) 密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法を用いて、注目領域を空間クラスタとして抽出し、(2) (1)で抽出した各マルチモーダル空間クラスタについて、空間クラスタに含まれるソーシャル画像データから代表画像データをネットワークベースの重要度算出手法を用いて選出する。

3.3 注目領域抽出

ジオソーシャル画像データ集合中で類似したジオソーシャル画像データはユーザの関心が高いトピックを含んでいる可能性が高い。また、類似したジオソーシャル画像データの投稿が集中している領域は、各地域においてユーザの関心が高いトピックである可能性が高い。そこで、密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法を用いて、空間的に近く、画像データとテキストデータの内容が類似したジオソーシャル画像

データ集合を空間クラスタとして抽出する。ジオソーシャル画像が持つ情報は、画像データだけでなく、位置情報、テキストデータを含むためマルチモーダルであり、マルチモーダルなデータの空間クラスタリングとして密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法を用いる。密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法については第4章で詳しく説明する。

3.4 代表画像データ抽出

密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法を用いて抽出したマルチモーダル空間クラスタは注目領域であるが、各空間クラスタが持つトピックは、各空間クラスタに含まれるジオソーシャル画像データをひとつひとつ閲覧しないと分からない。そこで、各空間クラスタに含まれるジオソーシャル画像データの類似度グラフを作成し、ネットワークベースの重要度算出手法を用いて、重要度を算出する。重要度の高い上位 t 件のジオソーシャル画像データを取り出し、代表画像データとしてユーザに提示することで、各注目領域が持つトピックが視覚的に把握することができる。ネットワークベースの重要度算出手法については第5章で詳しく説明する。

4 密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法

本章では、類似したジオソーシャル画像データが空間的に密に投稿されている領域を取り出すための密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法について説明する。

4.1 空間密度尺度

密度に基づくマルチモーダル空間クラスタは、密度に基づく空間クラスタリング手法⁴⁾の諸定義を拡張して定義される。密度に基づく空間クラスタリング手法では、データが密集している部分を空間クラスタ、密集していない部分を空間クラスタではないと定義し、空間クラスタを抽出する。密集しているかどうかの判断は、各データの近傍 ϵ 以内に、 $MinData$ 以上のデータが存在するかどうかで判定する。

本研究では、文献¹⁵⁾の手法に基づき、(1) あるジオソーシャル画像データについて、類似したジオソーシャル画像データが $MinGIS$ 以上、近傍に存在する場合、当該ジオソーシャル画像データ周辺の密度は高いと判断し、また、(2) 空間クラスタを形成する閾値である $MinGIS$ を各地域の投稿率で逓減することで、地域毎の密度に応じた空間クラスタを抽出可能としている。この逓減方法は、文献¹⁹⁾で提案されている統計データを用いた手法を用いている。

4.2 マルチモーダル類似度

ジオソーシャル画像データはマルチモーダルであり、本研究では、テキストデータと画像データの2つを考慮したマルチモーダル類似度を定める必要がある。例えば、ある2つのソーシャル画像データについて、テキストの内容は類似していても画像データが類似した場合、反対に、テキストの内容は類似しているが画像データは類似しない場合において、2つのソーシャル画像データは類似していると判断する尺度が必要となる。

本研究では、次の通り、テキストデータの類似度と画像データの類似度のトレードオフを用いることで、ジオソーシャル画像データのマルチモーダル類似関数 $msim$ を定める。

$$msim(gsi_k, gsi_l) = w \times tsim_{k,l} + (w - 1) \times isim_{k,l}, \quad (2)$$

ここで、 $tsim_{k,l}$ はテキストデータの類似度であり、 $isim_{k,l}$ は画像データの類似度である。

テキストデータの類似度 $tsim_{k,l}$ は、語句ベースのコサイン類似度を使用する。ここで、 $dt_k = \{tw_{k,1}, tw_{k,2}, \dots, tw_{k,|dt_k|}\}$ を $text_k$ に含まれる語句集合とする。ここで、 TW は、 $\{text_1, text_2, \dots, text_n\}$ に現れるすべての語句の集合である。本研究では、テキストデータ中に現れる名詞、動詞、形容詞を語句として扱う。

$$tsim_{k,l} = \frac{|dt_k \cap dt_l|}{\sqrt{|dt_k| |dt_l|}}. \quad (3)$$

画像データ $image_k$ については、深層学習である Stacked Denoising Autoencoders (SdA)⁶⁾ または、DBN (Deep Belief Network)⁸⁾ を用いて特徴ベクトル ifv_k を作成する。

SdA は Denoising Autoencoder を多層に積み重ねたネットワークであり、各層は Denoising Autoencoder で構成されている。Autoencoder は、入力層、隠れ層 (中間層)、出力層を持つニューラルネットワークのひとつであり、入力と出力が近くなるように入力層から隠れ層、隠れ層から出力層への重みを学習させることで、中間層に入力データの次元圧縮した特徴を取り出すことができる。Denoising Autoencoder は入力にノイズを与えることで学習能力を高めている。

SdA を用いた画像データの特徴ベクトル生成方法は次の通りである。

- (1) 学習用のジオソーシャル画像データに含まれる画像データ集合を用いて、各フェーズでは、Denoising Autoencoder の再現誤差を最小にするように、パラメータを学習する。入力層と隠れ層を取り出し隠れ層の出力値を次の入力層として Denoising Autoencoder を積み上げていく。
- (2) 分析対象のジオソーシャル画像データに含まれる画像データ $image_k$ をそれぞれ、SdA に入力し、最終層の dim 個のユニットの出力値を特徴ベクトル ifv_k とする。

DBN は、RBM (Restricted Boltzmann Machine)⁷⁾ を多層に積み重ねたネットワークである。また、RBM はグラフィカルモデルのひとつであり、可視層と隠れ層の2層から構成され、可視層にデータを入力して学習すると、発生分布を良く表すパラメータが特徴として隠れ層に現れるため、それを次元圧縮した特徴として取り出すことができる。

DBN を用いた画像データの特徴ベクトル生成方法は次の通りである。

- (1) 学習用のジオソーシャル画像データに含まれる画像データ集合を用いて、各フェーズでは、最

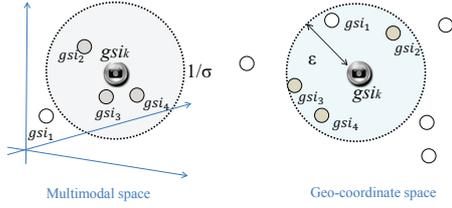


Fig. 2: Multimodal-Similarity-based Neighborhood.

尤推定によって、RBMのモデル・パラメータを求める。

- (2) 分析対象のジオソーシャル画像データに含まれる画像データ $image_k$ をそれぞれ、DBNに入力し、最終層の dim 個のユニットの出力値を特徴ベクトル ifv_k とする。

画像データ $image_k$ の特徴ベクトルについて、 j 次元目の値を $ifv_k[j]$ と表記すると、画像データのコサイン類似度は、

$$isim_{k,l} = \frac{\sum_{j=1}^{dim} ifv_k[j] \times ifv_l[j]}{\sqrt{\sum_{j=1}^{dim} ifv_k[j]^2} \sqrt{\sum_{j=1}^{dim} ifv_l[j]^2}}, \quad (4)$$

となる。

4.3 諸定義

本節ではクラスタを定義するための諸定義を述べる。

Definition 1 ((ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル近傍) ジオソーシャル画像データ gsi_k の (ϵ, σ) -近傍を $DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_k)$ と表記し、次のように定義する。

$$DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_k) = \{gsi_l \in SGSI | dist(gsi_k, gsi_l) \leq \epsilon \text{ and } msim(gsi_k, gsi_l) \geq \sigma\}, \quad (5)$$

関数 $dist$ は緯度・経度など座標値を使って、ジオソーシャル画像データ gsi_k と gsi_l 間の空間上の距離を求める関数であり、本研究では Lambert-Andoyer の公式を用いて計算した距離を返す。関数 $msim$ はジオソーシャル画像データ gsi_k と gsi_l 間の類似度を返す関数である。

Fig. 2 に (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル近傍の例を示す。この例では、 gsi_k のマルチモーダル近傍は、 $DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_k) = \{gsi_2, gsi_3, gsi_4\}$ である。ここで、 gsi_1 は、 gsi_k から ϵ 以内に存在しているが、 $DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_k)$ には含まれていない。これは、 gsi_1 と gsi_k の類似度が σ よりも小さいためである。

Definition 2 (局所的な投稿密度と閾値) ジオソーシャル画像データ gsi_k が存在する地域の局所的な投稿密度を $ldg(gsi_k)$ と表記する。ジオソーシャル画像データ gsi_k に対する閾値 AMN を次のように定義する。

$$AMN(gsi_k, MinGSI) = (MinGSI - 1) \times ldg(gsi_k) + 1. \quad (6)$$

グリッド i に含まれるジオソーシャル画像データの数を gn_i とし、関数 $geo_gid(gsi_k)$ をジオソーシャル画像データ gsi_k が位置するグリッドの ID を求める関数

とすると、 gsi_k の局所的な投稿密度 $ldg(gsi_k)$ は次の式で定義される。

$$ldg(gsi_k) = \frac{gn_{(geo_gid(gsi_k))} - gn_{min}}{gn_{max} - gn_{min}}. \quad (7)$$

ただし、 gn_{min} は最も投稿数が少ないグリッドに含まれるジオソーシャル画像データ数であり、 gn_{max} は最も投稿数の多いグリッドに含まれるジオソーシャル画像データ数である。

Definition 3 (核ジオソーシャル画像データ, 周辺ジオソーシャル画像データ) もし、ジオソーシャル画像データ gsi_k が、 $|DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_k)| \geq AMN(gsi_k, MinGSI)$ を満たすなら、 gsi_k を核ジオソーシャル画像データと呼ぶ。そうでなければ、周辺ジオソーシャル画像データと呼ぶ。

Definition 4 ((ϵ, σ) -密度に基づいて直接到達可能) ジオソーシャル画像データ gsi_l がジオソーシャル画像データ gsi_k の (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル近傍であり、 $|DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_k)| \geq AT(gsi_k, MinGSI)$ を満たす時、 gsi_l は gsi_k から (ϵ, σ) -密度に基づいて直接到達可能であると表現する。

Definition 5 ((ϵ, σ) -密度に基づいて到達可能) ジオソーシャル画像データ gsi_{k+1} がジオソーシャル画像データ gsi_k から (ϵ, σ) -密度に基づいて直接到達可能である、ジオソーシャル画像データ列 $(gsi_1, gsi_2, \dots, gsi_n)$ を考える。この時、 gsi_1 と gsi_n は、 (ϵ, σ) -密度に基づいて到達可能であると表現する。

Definition 6 ((ϵ, σ) -密度に基づいて接続) ジオソーシャル画像データ gsi_k とジオソーシャル画像データ gsi_l とが、ある任意のジオソーシャル画像データ gsi_o と (ϵ, σ) -密度に基づいて到達可能であり、 gsi_o が $|DMN_{(\epsilon, \sigma)}(gsi_o)| \geq AT(gsi_o, MinGSI)$ を満たす時、 gsi_k と gsi_l とは (ϵ, σ) -密度に基づいて接続していると表現する。

4.4 クラスタ定義

ジオソーシャル画像データ集合 $SGSI$ において、 (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル空間クラスタ MSC は以下の2つの条件を満たす部分ジオソーシャル画像データ集合である。

- (1) 任意のジオソーシャル画像データ $gsi_k \in SGSI$ と $gsi_l \in SGSI$ について、 (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル空間クラスタ MSC に gsi_k が所属 ($gsi_k \in MSC$) し、 gsi_l が gsi_k から (ϵ, σ) -密度に基づいて到達可能であれば、 gsi_l は (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル空間クラスタ MSC に所属 ($gsi_l \in MSC$) する。
- (2) (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル空間クラスタ MSC に所属する任意のジオソーシャル画像データ $gsi_k \in MSC$ と $gsi_l \in MSC$ とは、 (ϵ, σ) -密度に基づいて接続している。

```

input :  $SGSI$  - a set of geo-social images,  $\epsilon$  -
neighborhood radius,  $\sigma$  - similarity rate,
 $MinGSI$  - threshold value
output:  $SDMSC$  - a set of density-based
multimodal spatial clusters

 $cid \leftarrow 1$ ;
 $SDMSC \leftarrow \phi$ ;
for  $k \leftarrow 1$  to  $|SGSI|$  do
  if  $IsClustered(gsi_k) == false$  then
     $DMN \leftarrow GetNeighborIDs(gpi_k, \epsilon, \sigma)$ ;
    if  $|DMN| \geq AMN(gsi_k, MinGSI)$  then
       $DMSC_{cid}$ 
       $\leftarrow MakeNewSCluster(cid, gsi_k)$ ;
       $cid \leftarrow cid + 1$ ;
       $GSIQ \leftarrow \phi$ ;
       $EnQueue(GSIQ, DMN)$ ;
      while  $GSIQ$  is not empty do
         $l \leftarrow DeQueue(GSIQ)$ ;
         $DMN \leftarrow$ 
         $GetNeighborIDs(gsi_l, \epsilon, \sigma)$ ;
        if  $|DMN|$ 
         $\geq AMN(gsi_l, MinGSI)$  then
           $EnNniqueQueue(GSIQ, DMN)$ ;
        end
         $DMSC_{cid} \leftarrow DMSC_{cid} \cup gsi_k$ 
      end
       $SDMSC \leftarrow SDMSC \cup DMSC_{cid}$ ;
    end
  end
end
return  $SDMSC$ ;

```

Algorithm 1: Density-based Multimodal Spatial Clustering Algorithm.

4.5 アルゴリズム

Algorithm1 に (ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル空間クラスタを抽出するためのアルゴリズムを示す。ジオソーシャル画像データ集合 $SGSI$ において、核ジオソーシャル画像データを見つけ、マルチモーダル空間クラスタ MSC の核とする。そして、当該核ジオソーシャル画像データのマルチモーダル近傍を MSC に加え、加えたジオソーシャル画像データ中の核ジオソーシャル画像データについて、さらにその近傍を加えていくことを繰り返していく。

5 ネットワークベースの重要度算出手法

Fig. 3 にネットワークベースの重要度算出手法を示す。マルチモーダル空間クラスタ MSC_i に所属するジオソーシャル画像データ集合を $MSC_k = \{gsi_{k,1}, gsi_{k,2}, \dots, gsi_{k,num(k)}\}$ とする。ここで、 $num(k)$ はマルチモーダル空間クラスタ MSC_k に所属するジオソーシャル画像の総数とする。類似度グラフ $SG_i = (V_i, E_i)$ は、ノード集合 V_i と辺集合 E_i から構成される。ノード $v_{i,j} \in V_i$ はジオソーシャル画像データ $gsi_{i,j}$ に対応し、辺 $e = (j, k) \in E_i$ はノード $v_{i,j}$ とノード $v_{i,k}$ 間に辺が存在すること示す。

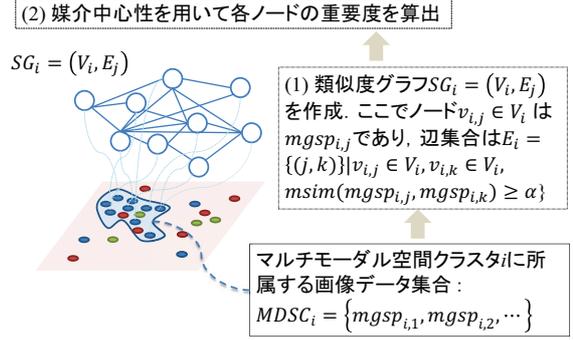


Fig. 3: Network-based Importance Analysis.

ここで、

$$E_i = \{(j, k) \mid v_{i,j} \in V_i, v_{i,k} \in V_i, msim(gsi_{i,j}, gsi_{i,k}) \geq \alpha\} \quad (8)$$

と定義できる。 α はパラメータであり、類似度が高いノード間の辺のみに制限することができる。

また、媒介中心性とは、ノードがどれくらいネットワーク上で重要な媒介を行っているかを示し、通常、ノード間の最短経路が何本通っているかで算出され、以下の式で表される。

$$BC(v_{i,j}) = \sum_{s \neq t \neq v_{i,j}} \frac{path_{s,t}(v_{i,j})}{path_{s,t}} \quad (9)$$

ここで、 $path_{s,t}(v_{i,j})$ はノード s とノード t 間の経路でノード $v_{i,j}$ を通る経路の数、 $path_{s,t}$ はノード s とノード t 間の経路の総数である。 $BC(v_{i,j})$ の値を計算し、 $BC(v_{i,j})$ の値が大きなノードが示すジオソーシャル画像データの重要度が大きくなる。

6 評価実験

提案手法を評価するために、評価実験を行った。本章では、評価実験の結果を示す。

6.1 データセットと実験環境

評価実験では、Twitter 上に投稿されたジオタグ付きツイートで画像 URL を持つツイートをジオソーシャル画像データとして扱い実験を行う。Twitter streaming API で取得した (2011 年 11 月から 2012 年 2 月まで) 392,912 件のジオタグ付きツイートを用いて、ジオソーシャル画像データの集合 $SGSI$ を構築した。実験では、京都府庁舎から半径 50km 以内のデータ 11,189 件を用いて、京都周辺のトピックを取り出した。

(ϵ, σ) -密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法のパラメータは、 $\epsilon = 500m$, $\sigma = 0.7$, $MinGSI = 5$, $w = 0.5$ を用いた。局所的な投稿密度の算出に用いる統計データは 3,301,605 件のジオタグ付きツイートを用いた。日本の最西端である与那国島の緯度・経度 (24.4494, 122.93361) と最北端である択捉島の緯度・経度 (45.5572, 148.752) からなる矩形を空間分割の対象領域とする。対象空間を、 $1,000 \times 1,000$ の $1,000,000$ グリッドに空間分割する。ジオソシヤ

Table 1: Top-5 Areas of Interest (Proposed Method - SdA).

ID	Number of Tweets	Range (longitude)	Range (latitude)	Top-5 Frequent Words
10	191	135.75200149 - 135.76434961	34.9819044 - 34.99082657	京都, 駅, ない, 市, 下京
4	94	135.77589205 - 135.7857	34.99363475 - 34.99821005	清水寺, 清水, 東山, 京都, 市
13	45	135.67733236 - 135.68136966	35.0112679 - 35.01426093	月橋, 渡, 京都, 区, 嵯峨
8	31	135.77730202 - 135.793	35.00917021 - 35.01610389	南禅寺, ない, 三門, 紅葉, 平安神宮
37	27	135.7657691 - 135.77663241	34.99974855 - 35.0096629	ない, 先斗, 町, 恵美須神社, 祇園

Table 2: Top-5 Areas of Interest (Proposed Method - DBN).

ID	Number of Tweets	Range (longitude)	Range (latitude)	Top-5 Frequent Words
4	321	135.7519184 - 135.7691693	34.97906077 - 34.99371366	京都, 駅, ない, 区, 市
1	172	135.75503111 - 135.77490628	34.99877176 - 35.01372872	京都, 市, 区, 町, ル
11	146	135.66887068 - 135.68158552	35.01032366 - 35.022244	月橋, 渡, 嵐山, 京都, 区
2	113	135.77589205 - 135.78573167	34.99363475 - 34.99995822	清水寺, 清水, 東山, 京都, 市
16	82	135.7632261 - 135.780774	34.99974855 - 35.01115985	ない, 八坂神社, 京都, 祇園, 初詣

Table 3: Top-5 Areas of Interest (Term-based Method).

ID	Number of Tweets	Range (longitude)	Range (latitude)	Top-5 Frequent Words
10	158	135.7519184 - 135.76434961	34.9819044 - 34.99082657	京都, 駅, ない, タワー, 新幹線
4	67	135.77589205 - 135.78573167	34.99363475 - 34.99821005	清水寺, ない, 清水, 舞台, なう
22	43	135.7657691 - 135.77709328	34.99974855 - 35.01301944	ない, 京都, 祇園, 三条大橋, 恵美須神社
8	35	135.77730202 - 135.79449713	35.00917021 - 35.01610389	南禅寺, ない, 平安神宮, 三門, 紅葉
16	27	135.67733236 - 135.68623307	35.01122997 - 35.01426093	渡, 月橋, 紅葉, ない, 嵐山

ル画像データの位置情報から、各グリッドの投稿数を求め、正規化した値をグリッドの投稿密度とする。また、形態素解析には MeCab を用いた。

実験では、Pylearn2 の Autoencoder として Denoising Autoencoder を、RBM として Gaussian Binary RBM を用いて実験を行った。画像データは $48 \times 48 = 2,304$ 画素のモノクロ画像に変換し、SdA と DBN は、5 層から構成され、各層のユニット数は、第 1 層 (入力層) = 2,304, 第 2 層 (隠れ層) = 512, 第 3 層 (隠れ層) = 256, 第 4 層 (隠れ層) = 128, 第 5 層 (出力層) = 128 である。第 4 層の値を恒等写像した値が出力層からそのまま出力される。

6.2 実験結果

Table 1, Table 2 と Table 3 とに、SdA を画像データの特徴量抽出に使用した場合、DBN を画像データの特徴量抽出に使用した場合とテキストデータのみを使用した場合のトピック抽出結果を示す。SdA を使用した場合は 68 クラスタ、DBN を使用した場合は 81 クラスタ、テキストデータのみを使用した場合は 82 クラスタが抽出された。

各手法において、最もツイート数の多いクラスタは、京都駅と京都タワーに関するトピックを含むクラスタとなった。しかし、クラスタのツイート数を見ると、SdA を使用した場合は 191 ツイート、DBN を使用した場合は 321 ツイート、テキストデータのみを使用した場合は 158 ツイートとなっており、DBN を使用した場合はクラスタのツイート数が多くなっている。DBN を使用して作成した画像データの特徴量は、画像データ間のコサイン類似度が高くなり、京都駅だけでなく京都駅周辺の飲食店や観光名所が同じクラスタとして抽出されている。また、同様に、DBN を使用した場合は、他のクラスタでもツイート数が他の手法と比べて多い結果となった。

DBN を使用した場合のみ、八坂神社に関するクラス

タが上位 5 位以内に入っている。DBN を使用して作成した画像データの特徴量は、画像データ間のコサイン類似度が高くなるため、祇園などの八坂神社と空間上で近いトピックがひとつのクラスタとして抽出されている。他の 2 手法では、祇園と八坂神社は別々のクラスタとして抽出されツイート数が少なくなったため、上位 5 位には入らなかった。

Fig. 4(a), Fig. 4(b) と Fig. 4(c) とに、SdA を画像データの特徴量抽出に使用した場合、Fig. 5(a), Fig. 5(b) と Fig. 5(c) とに、DBN を画像データの特徴量抽出に使用した場合のクラスタの代表画像データを示す。各図には、上位 3 位の各クラスタから抽出した、上位 5 位の中心画像を示している。代表画像データを見ると、夜に撮影された画像データが多く抽出されている。この原因としては、画像データをモノクロ画像に変換し特徴量を抽出するため、明るい画像データ同士よりも、黒い画素が多い画像データ間の類似度が高くなり、重要度が高くなったためだと考えられる。

SdA を使用した場合のクラスタ 4 とクラスタ 13 は、それぞれ清水寺と渡月橋に関するクラスタである。上位 5 位の全ての代表画像データを見ても、それぞれ清水寺と渡月橋に関する画像データが抽出できている。しかし、京都駅と京都タワーに関するクラスタ 10 では、第 5 位の代表画像データにトピックとは関係の無い画像データが抽出されている。

DBN を使用した場合のクラスタ 1 は、画像データの重要度が低く、第 3 位以降の代表画像データの重要度は 0 となった。このクラスタは、京都の様々なトピックを含むクラスタであり画像データも様々であるため、画像データ間のコサイン類似度が低くなり、重要度も低くなったと考えられる。

7 まとめ

本研究では、ソーシャルメディア上に日々投稿される位置情報と画像の内容を記載したテキストを持つ画

順位	番号	テキストデータ
1	4823	京都タワー、めっさでかい！
2	7741	来ちゃった。(@ 京都駅 (Kyoto Sta.) w/ 16 others)
3	6612	たわわなう
4	3620	京都駅～在来線
5	11180	タビガラ。会議わず！ラーメンなう(*^▽^*)



(a) cluster10.

順位	番号	テキストデータ
1	11048	京都なう。雨が一、
2	4823	京都タワー、めっさでかい！
3	9328	京都なう
4	6612	たわわなう
5	2571	東本願寺なう！



(a) cluster4.

順位	番号	テキストデータ
1	10140	清水寺
2	3131	夜の特別拝観 (@ 清水寺 (Kiyomizu-dera Temple) w/ 8 others)
3	7370	清水寺
4	8251	【OCD】清水寺から、あけおめこ！
5	5167	I'm at 清水の舞台 (清水寺本堂) (東山区清水1-294, 京都市) w/ 2 others



(b) cluster4.

順位	番号	テキストデータ
1	6320	此処の銀杏はまだ散りませんなあ (@ Starbucks Coffee 京都烏丸六角店)
2	4045	マイマイ京都へ (@ 河原町駅 (Kawaramachi Sta.) w/ 3 others)
3	5021	#京都 #kyoto #UKY (@ 錦市場 Nishiki Market w/ 2 others)



(b) cluster1.

順位	番号	テキストデータ
1	6131	渡月橋なう。
2	5085	本日渡るの三回目 (@ 渡月橋 w/ 2 others)
3	4835	花灯路NOW。スゴイです！^^; (@ 渡月橋 w/ 9 others)
4	5455	I'm at 渡月橋 (右京区嵯峨中ノ島町?, 京都市)
5	4822	渡月橋はすごい人



(c) cluster13.

順位	番号	テキストデータ
1	5213	夜の渡月橋ってのもいいねえ。。 #京都 #kyoto #UKY (@ 渡月橋 w/ 2 others)
2	2847	渡月橋(???)?
3	2740	阪急嵐山から市街に戻ります。
4	6144	嵐山花灯路 (@ 渡月橋 w/ 3 others)
5	4283	I'm at 渡月橋 (右京区嵯峨中ノ島町?, 京都市) w/ 2 others



(c) cluster11.

Fig. 4: Top-5 geo-social images (SdA).

像データを、ジオソーシャル画像データと呼び、密度に基づくマルチモーダル空間クラスタリング手法を用いて、ジオソーシャル画像データから各地域のトピックを抽出する手法を提案した。提案手法では、最初に、密度に基づくマルチモーダルクラスタリング手法を用いて、注目領域を空間クラスタとして抽出する。次に、空間クラスタに含まれるトピックを自動的に抽出し、可視化するために、代表画像データを特定する。評価実験の結果、各地域のトピックを取り出すことができることを確認できた。これからの課題としては、マルチモーダル類似度算出方法の改善があげられる。具体的

Fig. 5: Top-5 geo-social images (DBN).

には、テキストデータと画像データを別々に評価しているため、深層学習を用いて特徴ベクトル化し、統一的に類似度を算出すること、また、ユーザ情報や時間情報も加えて、より詳細なトピック抽出を行えるようにしていきたい。

謝辞

本研究の一部は、JSPS 科研費 26330139 と広島市立大学・特定研究費の支援により行われた。

参考文献

- 1) Till Quack, Bastian Leibe, and Luc Van Gool. World-scale mining of objects and events from community photo collections. In *Proceedings of the 2008 International Conference on Content-based Image and Video Retrieval*, CIVR '08, pages 47–56, 2008.
- 2) Tye Rattenbury, Nathaniel Good, and Mor Naaman. Towards automatic extraction of event and place semantics from flickr tags. In *Proceedings of the 30th Annual International ACM SIGIR Conference on Research and Development in Information Retrieval*, SIGIR '07, pages 103–110, 2007.
- 3) David J. Crandall, Lars Backstrom, Daniel Huttenlocher, and Jon Kleinberg. Mapping the world's photos. In *Proceedings of the 18th International Conference on World Wide Web*, WWW '09, pages 761–770, 2009.
- 4) Jörg Sander, Martin Ester, Hans-Peter Kriegel, and Xiaowei Xu. Density-Based Clustering in Spatial Databases: The Algorithm GDBSCAN and Its Applications. *Data Min. Knowl. Discov.*, 2(2):169–194, jun 1998.
- 5) Geoffrey E. Hinton and Ruslan Salakhutdinov. Reducing the Dimensionality of Data with Neural Networks. *Science*, 313:504–507, July 2006.
- 6) Pascal Vincent, Hugo Larochelle, Yoshua Lajoie, Isabelle and Bengio, and Pierre-Antoine Manzagol. Stacked denoising autoencoders: Learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion. *J. Mach. Learn. Res.*, 11:3371–3408, dec 2010.
- 7) David H. Ackley, Geoffrey E. Hinton, and Terrence J. Sejnowski. Connectionist models and their implications: Readings from cognitive science. chapter A Learning Algorithm for Boltzmann Machines, pages 285–307. Ablex Publishing Corp., Norwood, NJ, USA, 1988.
- 8) Geoffrey E. Hinton, Simon Osindero, and Yee-Whye Teh. A fast learning algorithm for deep belief nets. *Neural Comput.*, 18(7):1527–1554, jul 2006.
- 9) Alexandar Jaffe, Mor Naaman, Tamir Tassa, and Marc Davis. Generating summaries and visualization for large collections of geo-referenced photographs. In *Proceedings of the 8th ACM International Workshop on Multimedia Information Retrieval*, MIR '06, pages 89–98, 2006.
- 10) Lyndon Kennedy, Mor Naaman, Shane Ahern, Rahul Nair, and Tye Rattenbury. How flickr helps us make sense of the world: Context and content in community-contributed media collections. In *Proceedings of the 15th International Conference on Multimedia*, pages 631–640, 2007.
- 11) Keiji Yanai, Keita Yaegashi, and Bingyu Qiu. Detecting Cultural Differences using Consumer-generated Geotagged Photos. In *Proceedings of the 2nd International Workshop on Location and the Web*, LOCWEB '09, pages 12:1–12:4, 2009.
- 12) Ling Chen and Abhishek Roy. Event detection from flickr data through wavelet-based spatial analysis. In *Proceedings of the 18th ACM Conference on Information and Knowledge Management*, pages 523–532, 2009.
- 13) Slava Kisilevich, Florian Mansmann, and Daniel Keim. P-dbscan: A density based clustering algorithm for exploration and analysis of attractive areas using collections of geo-tagged photos. In *Proceedings of the 1st International Conference and Exhibition on Computing for Geospatial Research and Application*, pages 38:1–38:4, 2010.
- 14) Motohiro Shirai, Masaharu Hirota, Shohei Yokoyama, Naoki Fukuta, and Hiroshi Ishikawa. Discovering multiple hotspots using geo-tagged photographs. In *Proceedings of the 20th International Conference on Advances in Geographic Information Systems*, pages 490–493, 2012.
- 15) Tatsuhiro Sakai, Keiichi Tamura, and Hajime Kitakami. Extracting attractive local-area topics in geo-referenced documents using a new density-based spatial clustering algorithm. *IAENG International Journal of Computer Science*, 41:131–140, aug 2014.
- 16) Rongrong Ji, Yue Gao, Bineng Zhong, Hongxun Yao, and Qi Tian. Mining flickr landmarks by modeling reconstruction sparsity. *ACM Trans. Multimedia Comput. Commun. Appl.*, 7S(1):31:1–31:22, nov 2011.
- 17) Manos Schinas, Symeon Papadopoulos, Yiannis Kompatsiaris, and Pericles A. Mitkas. Visual event summarization on social media using topic modelling and graph-based ranking algorithms. In *Proceedings of the 5th ACM on International Conference on Multimedia Retrieval*, ICMR '15, pages 203–210, 2015.
- 18) Philip J. McParlane, Andrew James McMinn, and Joemon M. Jose. "picture the scene...": Visually summarising social media events. In *Proceedings of the 23rd ACM International Conference on Conference on Information and Knowledge Management*, CIKM '14, pages 1459–1468, 2014.
- 19) T. Sakai, K. Tamura, and H. Kitakami. Density-based adaptive spatial clustering algorithm for identifying local high-density areas in georeferenced documents. In *Systems, Man and Cybernetics (SMC), 2014 IEEE International Conference on*, pages 513–518, Oct 2014.

SLS-SVMにおけるスパース性向上方式

○江渕文人 北村拓也 (富山高等専門学校)

Improvement of sparsity for SLS-SVM

*F. Ebuchi and T. Kitamura (National Institute of Technology, Toyama College)

Abstract– In this paper, we propose a novel method that reduces the number of support vectors in sparse least squares support vector machine in empirical feature space. The empirical feature space is generated by the linearly independent training data as basis vectors, which become support vectors. In the proposed method, unlike the previous method, we remove the basis vectors, which are closely similar to other basis vectors, of the empirical feature space. Using benchmark datasets, we show the effectiveness of the proposed method.

Key Words: Least squares support vector machine, Empirical feature space, Pattern recognition

1 はじめに

パターン認識における代表的な識別器の一つに Vapnik により提案されたサポートベクトルマシン (SVM : Support Vector Machine)^{1,2)} が挙げられる。SVM は汎化能力が高く、カーネル法³⁾ の適用によって非線形問題への拡張が容易である。また、実問題において、計算量とメモリ保持の観点から解のスパース性が求められるが、SVM は解がスパースであることから広く利用されている。しかしながら、通常の SVM では凸二次計画問題を解く必要があるため、計算コストが膨大となりうる。Suykens らのグループにより提案された最小自乗 SVM (LS-SVM : Least Squares SVM)^{2,4)} では、一次連立方程式を解くことで最適解が得られる。そのため、小規模データにおいて高速学習が可能である。しかしながら、LS-SVM では全教師データがサポートベクトル (SV : Support Vector) となるため、解のスパース性が失われる。LS-SVM にスパース性を付与したモデルとして Abe により標本特徴空間を用いたスパース LS-SVM (SLS-SVM : Sparse LS-SVM)^{5,6)} が提案されている。SLS-SVM では高次元特徴空間上で一次独立な教師データを選択し、それらの教師データを基底ベクトルとする標本特徴空間^{5,7)} 上で LS-SVM を解くことで解を導出する。このとき、決定関数は一次独立な教師データのみを用いて決定できるため、それらが SV となり、解がスパースとなる。ここで、一次独立な教師データの選定にコレスキー分解⁸⁾ などを用いるが、その際、入力された順で逐次比較して一次独立性の判定を行うが、判定の順番が早ければ早いほど一次独立と判定されやすくなる。しかしながら、判定順序を決定していないため、汎化能力の劣化につながりうる。浅野氏らにより提案されている目的関数値に基づいた特徴選択による SLS-SVM (ISLS-SVM : Improved SLS-SVM)⁹⁾ では、各教師データが張る一次元特徴空間上で LS-SVM を解いたときの目的関数値を基に一次独立性の判定順序を入れ替える。LS-SVM は最小化問題を解くため、目的関数値が小さいほど識別の観点から標本特徴空間の基底ベクトルに適しているといえる。そのため、対応する目的関数値が昇順となるように判定順序を入れ替えることにより、識別の観点からより良い教師データが標本特徴空間の基底ベクトルに選択されやすくなり、汎化能力が向上が期待できる。しかしながら、SLS-SVM と ISLS-SVM は共に、一次独立性のみで基底ベクトルの選択をしているため、

各教師データが張る一次元特徴空間上で似たデータ分布を持つ教師データが標本特徴空間の基底ベクトルに選択される場合がある。そのような教師データを標本特徴空間の基底ベクトルから取り除くことで、汎化能力を維持したまま SV 数の削減が可能である。

そこで本論文では、データ間の類似度に基づくスパース性向上方式を提案する。高次元特徴空間上で教師ベクトルが位相の観点から類似している場合、それらの教師データが張る一次元特徴空間のデータ分布が類似する。本手法では、高次元特徴空間上の教師データに余弦を基にした類似度を考えることで SV 数の削減を行う。まず、ISLS-SVM と同様に識別の観点から標本特徴空間の基底ベクトルとして適した一次独立な教師データを得る。これらの一次独立な教師データのうち目的関数値が最も小さい教師データを基準として他の一次独立な教師データとの余弦を求める。余弦の値があらかじめ定めた閾値よりも大きいとき、その教師データは基準の教師データと類似していると判定し削除する。次に、削除されなかった教師データの中で次に小さい目的関数値に対応する教師データを基準として、同様の処理を繰り返す。これらの処理を繰り返すことにより、類似した基底ベクトルを全て削除できる。最後に生成された標本特徴空間上で LS-SVM を用いて学習する。このとき、決定関数は基底ベクトルとなる教師データのみを用いて導くことができ、従来の ISLS-SVM と比べてスパース性が増すことは明らかである。また、データ分布が類似する基底ベクトルを取り除いているため、汎化能力の劣化が生じないと考えられる。

本論文では、2 節で従来手法の各 SVM、3 節で提案手法について述べる。4 節では 2 クラス問題における計算機実験での結果を示し、従来手法との比較・評価を行い、5 節でまとめを述べる。

2 標本特徴空間を用いた SLS-SVM

2.1 LS-SVM

LS-SVM の決定関数 $D(\mathbf{x})$ は次式である。

$$D(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}) + b \quad (1)$$

ここで、 \mathbf{x} は l 次元入力ベクトル、 \mathbf{w} は n 次元重みベクトル、 $\phi(\cdot)$ は n 次元特徴空間への写像関数 ($l \leq n$) で、 b はバイアス項である。全教師データ数が m 個の 2 ク

ラス問題において、決定関数を求めるために必要なパラメータは以下の最適化問題を解くことで得られる。

$$\min \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^m \xi_i^2 \quad (2)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_i) + b = y_i - \xi_i \quad (3)$$

for $i = 1, 2, \dots, m$

ここで C はマージンパラメータであり、マージンの最大化と誤認識の最小化のトレードオフを決定している。また、 ξ_i は $\phi(\mathbf{x}_i)$ に対応するスラック変数である。 y_i はクラスラベルを示し、教師データ \mathbf{x}_i が Class1 の時に $y_i = 1$ 、Class2 の時に $y_i = -1$ とする。式 (2) の第一項はマージンの最大化、第二項は誤認識の最小化を示している。ここで m 個のラグランジュ乗数 $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m)$ を導入すると以下のように式変形ができる。

$$Q = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \mathbf{w} + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^m \xi_i^2 - \sum_{i=1}^m \alpha_i (\mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_i) + b - y_i + \xi_i) \quad (4)$$

式 (4) を用いると、最適解では以下の KKT 条件を満足する。

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{0} \rightarrow \mathbf{w} = \sum_{i=1}^m \alpha_i \phi(\mathbf{x}_i) \quad (5)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \rightarrow \sum_{i=1}^m \alpha_i = 0 \quad (6)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi} = \mathbf{0} \rightarrow C \xi_i = \alpha_i \quad (7)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \alpha} = \mathbf{0} \rightarrow \mathbf{w}^T \phi(\mathbf{x}_i) + b - y_i + \xi_i = 0 \quad (8)$$

式 (5)、式 (7) を式 (8) に代入し、式 (6) の 2 式を用いて連立方程式を解くと以下ようになる。

$$\alpha = \Omega^{-1} (\mathbf{y} - \mathbf{1}b) \quad (9)$$

$$b = (\mathbf{1}^T \Omega^{-1} \mathbf{1})^{-1} \mathbf{1}^T \Omega^{-1} \mathbf{y} \quad (10)$$

ただし、

$$\Omega_{ij} = \phi^T(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}_j) + \frac{\delta_{ij}}{C} \quad (11)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 (i = j) \\ 0 (i \neq j) \end{cases} \quad (12)$$

また、式 (5) を式 (1) に代入すると以下ようになる。

$$\begin{aligned} D(\mathbf{x}) &= \sum_{i=1}^m \alpha_i \phi^T(\mathbf{x}_i) \phi(\mathbf{x}) + b \\ &= \sum_{i=1}^m \alpha_i K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) + b \end{aligned} \quad (13)$$

上式より、決定関数は全教師データを用いるため、全教師データが SV となる。したがって、解のスパース性が失われている。

2.2 標本特徴空間を用いることによる LS-SVM のスパース化

コレスキー分解を用いた一次独立性の判定を用いた SLS-SVM について述べる。

一次独立な教師データのみで生成したカーネル行列は正則である。しかしながら、一次従属な教師データが含まれるとカーネル行列は正則性を失う。カーネル行列を $K = K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$ とすると K はコレスキー分解により以下のように分解される。

$$K = LL^T \quad (14)$$

ここで L は正則な下三角行列である。 L の要素 L_{ij} は以下のように与えられる。

$$L_{op} = \frac{K_{op} - \sum_{i=1}^{p-1} L_{pi} L_{oi}}{L_{pp}} \quad (15)$$

$$\text{for } o = 1, \dots, m \quad p = 1, \dots, o - 1$$

$$L_{aa} = \left(K_{aa} - \sum_{i=1}^{a-1} L_{ai}^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (16)$$

$$\text{for } a = 1, \dots, m$$

対角要素 L_{aa} の平方根が閾値 η より小さいとき対応する教師データを一次従属と判定し、対応する行と列を削除する。これを繰り返すことで最後に残った教師データが一次独立として判定される。式 (15)、式 (16) より、入力順で一次独立性の判定が行われている。

コレスキー分解により得られた一次独立な教師データを $\{\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N\}$ ($N \leq m$) とすると、教師データ \mathbf{x} を標本特徴空間へ写像する写像関数 $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ は以下ようになる。

$$\mathbf{h}(\mathbf{x}) = (K(\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}), \dots, K(\mathbf{x}'_N, \mathbf{x}))^T \quad (17)$$

また、決定関数は以下ようになる。

$$D(\mathbf{x}) = \mathbf{v}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}) + b_e \quad (18)$$

ここで、 \mathbf{v} は標本特徴空間上での N 次元重みベクトル、 b_e はバイアス項である。標本特徴空間上での LS-SVM は以下の最適化問題を解くことで学習できる。

$$\min \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{v} + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^m \xi_i^2 \quad (19)$$

$$\text{s.t. } \mathbf{v}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}_i) + b_e = y_i - \xi_i \quad (20)$$

for $i = 1, 2, \dots, m$

この最適化問題は 2.1 節で述べた LS-SVM と同様に双対問題を解くことにより解を導出できるが、 $N < m$ で

あるため、主問題を解く方が計算コストが小さくなる。式 (20) を式 (19) に代入することで以下の式を得る。

$$Q(\mathbf{v}, \xi, b) = \frac{1}{2} \mathbf{v}^T \mathbf{v} + \frac{C}{2} \sum_{i=1}^M (y_i - \mathbf{v}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}_i) - b_e)^2 \quad (21)$$

上式を最小化問題として解くと以下のように、 \mathbf{v} , b_e が求まる。

$$b_e = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (y_i - \mathbf{v}^T \mathbf{h}(\mathbf{x}_i)) \quad (22)$$

$$\mathbf{v} = \left(\frac{1}{C} + \sum_{i=1}^M \mathbf{h}(\mathbf{x}_i) \mathbf{h}^T(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{M} \sum_{i,j=1}^M \mathbf{h}(\mathbf{x}_i) \mathbf{h}^T(\mathbf{x}_j) \right)^{-1} \left(\sum_{i=1}^M y_i \mathbf{h}(\mathbf{x}_i) - \frac{1}{M} \sum_{i,j=1}^M y_i \mathbf{h}(\mathbf{x}_j) \right) \quad (23)$$

式 (17) より決定関数は一次独立な教師データのみで決定されるため、解がスパースとなる。しかしながら、コレスキー分解は逐次判定であるため、判定の順が早いほど一次独立として判定される可能性が高くなる。このような特徴から、識別の観点から基底ベクトルに適した教師データが一次従属として判定される。

2.3 ISLS-SVM

ISLS-SVM では識別の観点から基底ベクトルに適した教師データから順に一次独立性の判定を行うようにカーネル行列をソートする。

高次元特徴空間上で教師データ $\phi(\mathbf{x}_i) (i = 1, \dots, m)$ を選択する。この教師データを基底ベクトルとする一次元特徴空間へ入力 \mathbf{x} を写像する写像関数 $h_i(\mathbf{x})$ は以下のようになる。

$$h_i(\mathbf{x}) = \frac{K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})}{\sqrt{K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i)}} \quad (24)$$

この一次元特徴空間上に全教師データを写像し、式 (21) の $\mathbf{h}(\mathbf{x})$ を $h_i(\mathbf{x})$ に入れ替えて最適化問題を解くことにより、目的関数値を得る。基底ベクトルとなる教師データを変更して同様の処理を繰り返すことにより、教師データ数と同数の目的関数値を得る。LS-SVM は最小化問題を解くため、目的関数値が小さいほどマージン最大化と誤差最小化の観点から基底ベクトルに優れていると考えられる。得られた目的関数値が昇順となるように対応する教師データをソートし、コレスキー分解を行うことにより、識別の観点から基底ベクトルに適した教師データが一次独立として判定されやすくなる。しかしながら、SLS-SVM と ISLS-SVM では、一次独立性のみで判定しており、位相的に類似した教師データが基底ベクトルとして選定されるため、十分にスパース性を付与できていない可能性がある。

Fig. 1 に 2 クラスベンチマークデータセットの Banana において、高次元特徴空間上で位相の観点から類似した

一次独立な二つの教師データが基底ベクトルを張る空間を示す。ここで、+ はクラス 1, □ はクラス 2 の教師データを意味する。Fig. 1 を見て分かるように、データ分布はおおよそ $K(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) = K(\mathbf{x}_2, \mathbf{x})$ の直線上に分布している。基底ベクトルである二つの教師データが高次元特徴空間上で位相的に類似しているため、それらが張る一次元特徴空間上のデータ分布が類似する。このような基底ベクトルが存在する際、どちらか一方を取り除くことにより、汎化能力を維持したままスパース性の向上が可能であると考えられる。

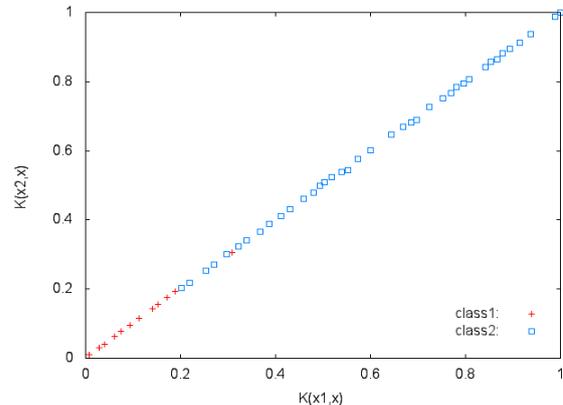


Fig. 1: Closely similar basis vectors of ISLS-SVM

3 提案手法

前節で述べた ISLS-SVM の問題点を解消するため、位相的に類似している教師データを標本特徴空間の基底ベクトルから取り除くことで、汎化能力を維持したまま SV 数の削減が可能であると考えられる。

はじめに、ISLS-SVM と同様に識別の観点から一次独立な教師データ $\{\mathbf{x}'_1, \mathbf{x}'_2, \dots, \mathbf{x}'_N\}$ を得る。添え字は選択された順に対応する。次に一次独立な教師データ $\mathbf{x}'_p (p = 1, 2, \dots, N-1)$ と $\mathbf{x}'_q (q = 2, \dots, N, q > p)$ との類似度 $\cos \theta_{pq}$ を以下のように求める。

$$\begin{aligned} \cos \theta_{pq} &= \frac{\phi(\mathbf{x}'_p) \cdot \phi(\mathbf{x}'_q)}{\|\phi(\mathbf{x}'_p)\| \|\phi(\mathbf{x}'_q)\|} \\ \iff \cos \theta_{pq} &= \frac{K(\mathbf{x}'_p, \mathbf{x}'_q)}{\sqrt{K(\mathbf{x}'_p, \mathbf{x}'_p)} \sqrt{K(\mathbf{x}'_q, \mathbf{x}'_q)}} \quad (25) \end{aligned}$$

$|\cos \theta_{pq}|$ が 0 の時に $\phi(\mathbf{x}'_p)$ と $\phi(\mathbf{x}'_q)$ は直交であり、値が大きくなるにつれ位相的に類似していく。したがって、 $|\cos \theta_{pq}|$ があらかじめ定めた閾値 β よりも大きいとき教師データ \mathbf{x}'_q は \mathbf{x}'_p に位相の観点から類似していると判定し、標本特徴空間を生成する基底ベクトルから除外する。同様の処理を基準とする一次独立な教師データを削除されていない教師データの中から対応する目的関数値が小さい順に変更していき、判定を行う教師データがなくなるまで繰り返す。このようにして得られた教師データを基底ベクトルとする標本特徴空間上で LS-SVM の最適化問題を解くことで最適解を得る。ISLS-SVM の標本特徴空間の基底ベクトルから不要な基底ベクトルを取り除くため、ISLS-SVM に比べてスパースとなる。

以下に提案手法のアルゴリズムを示す。

Step 1 目的関数値に基づきソートしたカーネル行列をコレスキー分解することにより得られた一次

独立な教師データを $\{x'_1, x'_2, \dots, x'_N\}$ とする。

- Step 2** $F_i = 1 (i = 1, 2, \dots, N)$ とする。
Step 3 $p = 1$ とする。
Step 4 $F_p = 0$ ならば, Step 10 へ進む. そうでなければ, Step 5 へ進む。
Step 5 $q = p + 1$ とする。
Step 6 $F_q = 0$ ならば, Step 9 へ進む. そうでなければ, Step 7 へ進む。
Step 7 式 (25) を用いて, $\phi(x'_p)$ と $\phi(x'_q)$ の余弦の値を求める。
Step 8 Step 7 で求めた $|\cos\theta_{pq}|$ が閾値 β より大きければ, $F_q = 0$ とする。
Step 9 $p = N$ ならば, Step 10 へ進む. そうでなければ, $q = q + 1$ として Step 6 へ戻る。
Step 10 $p = N - 1$ ならば, Step 11 へ進む. そうでなければ, $p = p + 1$ として Step 4 へ戻る。
Step 11 $F_i (i = 1, 2, \dots, N)$ の値が 1 である N' 個教師のデータを $\{x''_1, x''_2, \dots, x''_{N'}\}$ とし, 標本特徴空間の基底ベクトルとする。
Step 12 Step 11 で得られた教師データより式 (17) の写像関数を得る。
Step 13 式 (19), 式 (20) の最適化問題を解くことで, 式 (18) の決定関数を求める。

4 計算機実験

従来手法の SLS-SVM, ISLS-SVM と提案手法について 2 クラスベンチマークデータセット^{2, 10)} を用いた計算機実験を行い, SV 数, 汎化能力の比較・評価を行う. 本節では, 提案手法を“ISLS-reduction”と定義する。

4.1 計算機仕様

計算機実験に用いた計算機の仕様は OS : Windows 7 (64bit), CPU : AMD Athlon(tm) II X2 250 Processor, メモリ : 4.00GB である。

4.2 ベンチマークデータセット

Table 1 に示した 2 クラスベンチマークデータセットを用いて計算機実験を行った. ここで, “Data” はデータ名, “Input” は次元数, “Training” は教師データ数, “Test” はテストデータ数, “Sets” は教師データとテストデータの対を示す。

Table 1: Two-classes benchmark datasets

Data	Inputs	Training	Test	Sets
Banana	2	400	4900	100
B. cancer	9	200	77	100
Diabetes	8	468	300	100
German	20	700	300	100
Heart	13	170	100	100
Image	18	1300	1010	20
Ringnorm	20	400	7000	100
F. solar	9	666	400	100
Splice	60	1000	2175	20
Thyroid	5	140	75	100
Titanic	3	150	2051	100
Twonorm	20	400	7000	100
Waveform	21	400	4600	100

4.3 ハイパーパラメータの設定

SLS-SVM, ISLS-SVM において五分割交差検定法により, カーネル, カーネルパラメータ, マージンパラメータを決定する. 提案手法では, 比較のため, カーネ

ル, カーネルパラメータ, マージンパラメータは ISLS-SVM と同様にする. また, 提案手法では閾値 β のみを五分割交差検定法により決定する. カーネル関数³⁾ は, 線形カーネル ($K(x, x') = x \cdot x'$), 多項式カーネル ($K(x, x') = (x \cdot x' + 1)^d$), RBF カーネル ($K(x, x') = \exp(\gamma \|x - x'\|^2)$) のうち 1 つ用いる. 多項式カーネル, RBF カーネルのカーネルパラメータはそれぞれ, d, γ とし, $d = \{2, 3, 4, 5\}$, $\gamma = \{0.1, 0.5, 1.0, 1.5, 30, 5.0, 10, 15, 20, 50, 100, 200\}$ の中から決定する. マージンパラメータ C は, $C = \{0.1, 1, 5, 10, 50, 100, 500, 10^3, 5 \times 10^3, 10^4\}$ の中から決定する. また, コレスキー分解の閾値 η は, $\eta = \{10^{-2}, 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}, 10^{-6}\}$ から決定し, 余弦の閾値 β は, $\beta = \{0.80, 0.81, 0.82, 0.83, 0.84, 0.85, 0.86, 0.86, 0.87, 0.88, 0.89, 0.90, 0.91, 0.92, 0.93, 0.94, 0.95, 0.96, 0.97, 0.98, 0.99, 1.0\}$ から決定する. Table 2 に五分割交差検定法によって得られたハイパーパラメータを示す。

Table 2: Selected kernels and hyper-parameters by five-fold cross validation

Data	Method	Kernel	C	η	β
Banana	SLS-SVM	$\gamma = 20$	5×10^3	10^{-3}	-
	ISLS-SVM	$\gamma = 20$	5×10^3	10^{-2}	-
	ISLS-reduction	$\gamma = 20$	5×10^3	10^{-2}	0.96
B. cancer	SLS-SVM	$d = 2$	100	10^{-3}	-
	ISLS-SVM	linear	100	10^{-4}	-
	ISLS-reduction	linear	100	10^{-4}	0.99
Diabetes	SLS-SVM	$d = 3$	5	10^{-5}	-
	ISLS-SVM	$d = 3$	10	10^{-3}	-
	ISLS-reduction	$d = 3$	10	10^{-3}	1
German	SLS-SVM	$\gamma = 5$	50	10^{-3}	-
	ISLS-SVM	linear	5×10^3	10^{-3}	-
	ISLS-reduction	linear	5×10^3	10^{-3}	0.99
Heart	SLS-SVM	$\gamma = 15$	0.1	10^{-2}	-
	ISLS-SVM	linear	10^3	10^{-2}	-
	ISLS-reduction	linear	10^3	10^{-2}	1
Image	SLS-SVM	$d = 5$	10^4	10^{-5}	-
	ISLS-SVM	$d = 5$	10^4	10^{-6}	-
	ISLS-reduction	$d = 5$	10^4	10^{-6}	1
Ringnorm	SLS-SVM	$\gamma = 0.1$	50	10^{-4}	-
	ISLS-SVM	$\gamma = 1$	0.1	10^{-3}	-
	ISLS-reduction	$\gamma = 1$	0.1	10^{-3}	1
F. solar	SLS-SVM	$d = 3$	10	10^{-2}	-
	ISLS-SVM	$d = 5$	1.5	10^{-3}	-
	ISLS-reduction	$d = 5$	1.5	10^{-3}	0.97
Splice	SLS-SVM	$\gamma = 10$	100	10^{-2}	-
	ISLS-SVM	$\gamma = 10$	100	10^{-2}	-
	ISLS-reduction	$\gamma = 10$	100	10^{-2}	0.8
Thyroid	SLS-SVM	$\gamma = 20$	5×10^3	10^{-2}	-
	ISLS-SVM	$\gamma = 20$	500	10^{-2}	-
	ISLS-reduction	$\gamma = 20$	500	10^{-2}	0.98
Titanic	SLS-SVM	$\gamma = 10$	10	10^{-2}	-
	ISLS-SVM	linear	500	10^{-5}	-
	ISLS-reduction	linear	500	10^{-5}	0.99
Twonorm	SLS-SVM	$\gamma = 1.5$	5	10^{-4}	-
	ISLS-SVM	$\gamma = 1$	10	10^{-4}	-
	ISLS-reduction	$\gamma = 1$	10	10^{-4}	1
Waveform	SLS-SVM	$\gamma = 3$	100	10^{-4}	-
	ISLS-SVM	$\gamma = 20$	1.5	10^{-2}	-
	ISLS-reduction	$\gamma = 20$	1.5	10^{-2}	0.86

4.4 SV 数の評価

Table 3 に各手法の SV 数の平均値を示し, SV 数が最小となる結果を太字で示す. また, ISLS-reduction で余弦の閾値に 1 が選択されたデータセットでは SV 数が ISLS-SVM と等しいため, “-” を記す。

Table 3 より, CISLS-SVM では F. solar データセットを除くデータセットで最小の SV 数となっていること

が確認できる。これは高次元特徴空間上で位相的に類似した教師データをSVから除外したためであると考えられる。F. solar データセットにおいてSLS-SVMよりもSV数が多い原因はハイパーパラメータの決定においてSLS-SVMでは $d = 3$ と $\eta = 10^{-2}$, ISLS-SVMとISLS-reductionでは $d = 5$ と $\eta = 10^{-3}$ が選択されているため、高次元特徴空間で一次独立な教師データがSLS-SVMに比べて多かったためであると考えられる。また、ISLS-SVMと比べSV数が削減できていないB. cancer, Titanic データセットについては、ISLS-SVMの標本特徴空間の次元数と入力空間の次元数が等しく、それ以上削減することができなかつたためであると考えられる。

Table 3: Comparison of the number of SVs

Data	SLS-SVM	ISLS-SVM	CISLS-SVM
Banana	44	62	40
B. cancer	52	9	9
Diabetes	165	107	—
German	189	20	19
Heart	126	13	—
Image	277	453	—
Ringnorm	22	98	—
F. solar	32	68	56
Splice	977	977	958
Thyroid	29	32	29
Titanic	10	3	3
Twonorm	306	240	—
Waveform	393	398	344

4.5 汎化能力の評価

各手法でのテストデータでの認識率 [%] を Table 4 に示す。また、各データセットにおける最大認識率を太字で示し、ISLS-reduction の認識率がISLS-SVMの認識率と同等かそれを上回るデータセットにおいて認識率の前に“*”を記す。CISLS-SVMで余弦の閾値に1が選択されたデータセットではISLS-SVMと比べて変化がないため“-”を記す。

Table 4 より、German, Thyroid データセットを除くデータセットでISLS-reductionの認識率がISLS-SVMの認識率と比べて同等以上であることが確認できる。これはISLS-SVMの標本特徴空間の基底ベクトルのうち、位相的に類似した基底ベクトルのみを取り除いたことで認識率を維持したためであると考えられる。German, Thyroid データセットで認識率が下回った原因としてISLS-SVMで生成される標本特徴空間の基底ベクトルから識別に必要な基底ベクトルが取り除かれたためであると考えられる。しかし、Thyroid データセットにおいてはWelchのt検定(5%)より同等の認識率であると判定された。また、SLS-SVMと比較するとTitanic, Waveform データセットを除くデータセットで同等の認識率かそれを下回っていることが確認できる。しかし、Welchのt検定(5%)より、German データセットを除く全データセットで同等の認識率であると判定された。SV数が削減できた8個のデータセットのうち7個のデータセットでSLS-SVM, ISLS-SVMの認識率と同等であると判定された。したがって、提案手法ではISLS-SVMの汎化能力を維持していると考えられる。

5 まとめ

本論文では、SLS-SVMのスパース性向上手法を提案した。高次元特徴空間上の教師データ間の余弦を考える

Table 4: Comparison of the average recognition rates in percent and the standard deviation of the rates

Data	SLS-SVM	ISLS-SVM	CISLS-SVM
Banana	89.2 ± 0.50	89.2 ± 0.50	* 89.2 ± 0.53
B. cancer	74.1 ± 4.52	73.4 ± 4.69	*73.4 ± 4.62
Diabetes	77.0 ± 1.70	77.0 ± 1.55	—
German	75.9 ± 2.06	75.7 ± 2.16	75.0 ± 2.29
Heart	84.2 ± 3.28	84.0 ± 3.07	—
Image	91.7 ± 1.23	92.0 ± 1.10	—
Ringnorm	94.2 ± 2.95	93.7 ± 3.97	—
F. solar	66.6 ± 1.64	66.4 ± 1.56	*66.5 ± 1.57
Splice	89.3 ± 0.70	89.3 ± 0.70	* 89.3 ± 0.70
Thyroid	92.7 ± 2.76	92.7 ± 2.44	92.6 ± 2.47
Titanic	77.2 ± 0.82	77.3 ± 1.13	* 77.3 ± 1.13
Twonorm	97.5 ± 0.15	97.5 ± 0.16	—
Waveform	89.6 ± 0.62	90.3 ± 0.35	* 90.3 ± 0.34

ことで似たデータ分布を持つ標本特徴空間の基底ベクトルを取り除くことによりスパース性の向上を実現した。また、SLS-SVM, ISLS-SVM, 提案手法の計算機実験を行い、各手法のSV数, 認識率を比較・評価した。余弦の閾値に1が選択されたデータセットを除く大半のデータセットにおいて提案手法は従来手法と同等の汎化能力であり、SV数の削減が確認された。SLS-SVMに比べてSV数が増加した原因はハイパーパラメータによる影響であり、それを考慮するとスパース性はSLS-SVMを上回っているといえる。以上より、提案手法はISLS-SVMと同等の汎化能力で、スパース性の高い識別器であるといえる。

参考文献

- 1) V.N. Vapnik : Statistical Learning Theory, Jhon Wiley Sons, New York (1998)
- 2) S. Abe : Support vector machines for pattern classification (Advances in Pattern Recognition), Springer-Verlag, London (2010)
- 3) B. Schölkopf : The kernel trick for distances, Proc. Neural Information Processing Systems 13 (NIPS2000), 301/307 (2000)
- 4) J.A.K. Suykens and J. Vandewalle : Least squares support vector machine classifiers, Neural Processing Letters, vol. 9 no. 3, 293/300 (1999)
- 5) S. Abe : Sparse least squares support vector training in the reduced empirical feature space, Pattern Analysis and Applications, vol. 10 no. 3, 203/214 (2007)
- 6) T. Kitamura and T. Sekine : A novel method of sparse least squares support vector machines in class empirical feature space, Proc. 19th International Conference on Neural Information Processing (ICONIP2012), PartII, LNCS7664, 475/482 (2012)
- 7) H. Xiong, M. N. S. Swamy and M. O. Ahmad : Optimizing the kernel in the empirical feature space, IEEE Trans. Neural Networks, vol. 16 no. 2, 460/474 (2005)
- 8) D. Zdenek, K. Tomas, M. Martin and M. Alexandros : Cholesky decomposition of a positive semidefinite matrix with known kernel, Appl Math Comput, vol 213, no13, 6067/6077 (2011)

9) 浅野孝平, 北村拓也: 目的関数値に基づいた特徴
選択によるスパース LS-SVM, システム・情報部
門学術講演会 2014, GS4-1 (2014)

10) <http://archive.ics.uci.edu/ml/datasets.html>.