

9th SICE Symposium on Computational Intelligence
July 8–9, 2016, Chiba

第9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： 2016年7月8日（金），9日（土）

会 場： 千葉大学西千葉キャンパス

SICE®

カタログ番号 16 PG 0007

著作権 © 2016

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 16 PG 0007

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：2016年7月8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

第9回コンピューテーショナル・インテリジェンス研究会 プログラム

会場：千葉大学西千葉キャンパス

7月8日(金)：アカデミック・リンク・センター1階 コンテンツスタジオ「ひかり」

7月9日(土)：工学部13号棟2階アクティブラーニング室

※ 開催日ごとに会場が異なりますのでご注意ください

7月8日(金) 会場：アカデミック・リンク・センター1階 コンテンツスタジオ「ひかり」

13:00-14:00 学習・最適化アルゴリズム

関数最適化における群知能のモデルに関する考察

岩崎 悟, 肖 恒, ○ 畠中 利治 (大阪大学), 内種 岳詞 (理化学研究所) 1

学習データの分布に基づいた楕円形基底関数を用いたラジアル基底関数ネットワーク

○ 杉浦 宏樹, 岡本 卓, 小坪 成一 (千葉大学) 5

14:10-16:10 ロボティクス

Visual-based Docking Simulation of Underwater Vehicle Using Stereo Vision under Dynamic Light Environment

○ Myo Myint, 米森 健太 (岡山大学), 矢納 陽 (川崎医療短期大学),
Khin Nwe Lwin, 見浪 護 (岡山大学) 10

Visual Servoing to Longitudinally Moving Object Based on Hand/Eye-Vergence Dual Cameras System

○ 寇 ギョウ郡, 田 宏志, 見浪 護 (岡山大学) 16

3次元距離カメラを用いた未知物体把持のためのロボット知覚

○ 増田 寛之, 本吉 達郎, 小柳 健一, 大島 徹 (富山県立大学) 23

Analysis of Bracing-Constraint Dynamics with Energy-efficient for Elbow-bracing Manipulator

李 想, 見浪 護 (岡山大学), ○ 韓 寒, 魏 延輝 (哈爾濱工程大学) 28

16:20-17:30 コンピューテーショナル・インテリジェンス・フォーラム 2016

16:20-16:30 開会挨拶

16:30-17:30 人工知能を活用した新しい社会創発へのチャレンジ

講師：渡辺 祐樹 (カラフル・ボード株式会社)

18:00-20:00 技術交流会 会場：けやき会館1階・レストラン・コルザ

7月9日(土) 会場：工学部 13号棟 2階アクティブラーニング室

10:00-12:00 【テーマセッション】高次元ニューラルネットワーク

企画：SICE 部門連携・活性化委員会 応用クリフォード代数 WG

複素特異階段追跡法の解品質と計算時間の実験評価

○ 佐藤 聖也 (産業技術総合研究所), 中野 良平 (中部大学) 35

深層複素ニューラルネットワークの学習特性

○ 新田 徹 (産業技術総合研究所) 42

パラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリの改良

白石 充, ○ 長名 優子 (東京工科大学) 50

ホップフィールド型八元数ニューラルネットワークのモデルとエネルギー関数の存在条件

○ 黒江 康明, 飯間 等 (京都工芸繊維大学) 58

13:00-14:30 判別・推定・ニューラルネットワーク (1)

機械学習技術を用いた浴室内事故検知通報システム

○ 小林 祐介, 岡本 卓 (千葉大学) 64

自己符号化器による静脈画像の雑音除去

○ 柏原 考爾 (徳島大学) 68

単一縞情報を用いた3次元計測のためのブランチカット型符号推定法

○ 北原 大地, 山田 功 (東京工業大学) 73

14:40-16:10 判別・推定・ニューラルネットワーク (2)

判別分析の新理論と遺伝子解析

○ 新村 秀一 (成蹊大学) 77

Tackling Control Problems in General with Unified Neural Models

○ ヴァルガス ダニロ ヴァスコンセロス, 村田 純一 (九州大学) 85

忘却機能を持った Deep Belief Network による構造適応型学習

○ 鎌田 真 (広島市立大学), 市村 匠 (県立広島大学) 92

関数最適化における群知能のモデルに関する考察

岩崎悟 肖恒 ○畠中利治 (大阪大学) 内種岳詞 (理化学研究所)

A Consideration on Swarm Model for Numerical Function Optimization

S. Iwasaki, H. Xiao, *T. Hatanaka (Osaka University) and T. Uchitane (Riken)

Abstract— We consider a general model of the swarm intelligence for function optimization problems in this paper. The model is devised on a basis of mathematical swarming differential equation model and its difference approximation. Thus there are several parameters in the model corresponding to a repulsion effect, an attractive effect and a gradient direction. We mainly consider a repulsion effect and unknown gradient estimation in this study. The nature of the proposed model by some typical numerical simulation results is described. Then the numerous simulation results show that the behaviors of swarm will change significantly for example aggregation and clustering by parameter setting, we can see a well characteristic for the function optimization problem in the proposed model.

Key Words: Function Optimization, Differential Equation Model, Swarm Intelligence

1 はじめに

進化計算 (Evolutionary Computation) は、計算知能 (Computational Intelligence) における主要な研究分野の一つであり、盛んに研究が行われている。また、群知能 (Swarm Intelligence) ^{1, 2)} も進化計算と同様の目的をもつ計算法であり、進化計算のコミュニティにおいても研究が進められている。これらの方法に共通することは、複数の探索点を用いる集団ベースの方法であること、集団を構成する個体同士の相互作用と確率的操作を用いることおよび、探索点における目的関数値のみを集団の外部からの情報として用いることであり、特定の問題に対する計算モデルではなく、さまざまな問題に適用が可能なメタヒューリスティックスである。

例えば、遺伝的アルゴリズムは、生物の遺伝をモデルに突然変異や交叉が探索集団に変化をもたらす、目的関数値に基づく適者生存により探索が進行するように構成されている。一方で、群知能は、Kennedy らにより 1995 年に提案された Particle Swarm Optimization (PSO) ³⁾ が代表的であるが、蛍の発光による求愛行動にヒントを得たとされる Firefly Algorithm (FA) ⁴⁾ やカッコウの托卵を模した Cuckoo サーチ ⁵⁾、アリやハチなどの社会性昆虫の振る舞いにヒントを得た Ant Colony Optimization (ACO) ⁶⁾、Artificial Bee Colony (ABC) ⁷⁾、バクテリアの走化性行動に基づく Bacterial Foraging Optimization (BFO) ⁸⁾ などがあり、いずれの手法においても、何かしらの個体間の相互作用 (情報交換また共有) と確率的要素とを用いて、集団をより目的関数の値が優れた領域へ向かわせることがはかられている。

このように、近年では、数多くの生物規範型の最適化あるいは、探索、適応、学習のためのアルゴリズムが議論されているが、その多くは既存の手法の改良法であり、ベンチマーク問題における性能強化をそのエビデンスとして示すことに集中している。しかしながら、これらの手法において、より良い解候補を効率的に生成するメカニズムと局所解からの脱出を果たすメカニズムを個体間の相互作用と加味される確率的要素とから説明し、どのように寄与するかを明示的に示すことに成功している研究は少ない。

また、生物の振る舞いを規範とするのではなく、クーロン力 ⁹⁾ や重力 ¹⁰⁾ による力学系から構成された群知能による関数最適化法も提案されている。そこで我々は、このうちブラックボックス型の関数最適化問題を扱う、主に群知能型の方法に対して、生物の群れ形成の力学系からアプローチしている。Uchitane らは、この立場から、確率的魚群モデル ¹¹⁾ に基づく関数最適化の枠組みを構築し、関数最適化のアルゴリズムとしての機能を検証している ¹²⁾。このモデルでは、Boyd モデル ¹³⁾ のように探索点間の相互作用は引力と斥力の合成で記述され、魚群 (すなわち、複数の探索点) の、関数最適化の目的関数をポテンシャル関数とする場における振る舞いを数値シミュレーションにより確認し、魚群モデルによる極小値探索の可能性を示し、同時振動 ¹⁴⁾ に基づく勾配の推定を導入することにより、極小値探索が可能であることを示している。

本発表では、探索点が互いに反発しあう相互作用と勾配の推定による極小方向への誘引との 2 つの要素からなるモデルに基づき、いくつかのベンチマーク問題において、各々のパラメータを段階的に変化させたときの振る舞いを調査した結果から 2 つの機能のバランスから極小値への集中や複数の極小値への群の分離といった振る舞いが生じることを示す。

2 関数最適化

D 次元の実数値ベクトル $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_D)^T$ に対して、目的関数 $f(\mathbf{x}) \in \mathbb{R}$ を最小化 (あるいは最大化) する解 \mathbf{x}^* を求める問題を関数最適化問題という。多くの実問題は、関数最適化問題に定式化されるが、そのような問題のうち、 \mathbf{x} の関数値 $f(\mathbf{x})$ しか知ることができないクラスの問題をとくにブラックボックス最適化といい、実機やモデルによる評価実験やシミュレーションによってしか評価が得られないような問題をはじめ、現実の多くの問題がこのクラスに該当する。このような問題では、目的関数の勾配情報や、景観が単峰性か多峰性か、変数分離が可能か不可能かなどといった情報が、事前に明示的に与えられず、解析的に最適解を求めるのではなく、探索に基づく手法が用いられ、並列に探索点を処理する進化計算や群知能からのアプローチが盛んに利用されている。

これらの手法では、多峰性を前提に探索過程で局所解にトラップされるのを防ぎ大域的な探索を維持することや、複数の局所解へ探索点を分化させることあるいは、これらとは逆の作用となるある局所解における速い収束性能を得るためのさまざまな方法が検討されてきている。本研究では、この課題に対して、反発や誘因といった作用に基づき、構成的に群知能のモデルを検証することを考えている。

3 探索モデル

群知能における探索点は D 次元の実数値ベクトルであり、集団における i 番目の探索点を $\mathbf{x}_t^i \in R^D$ とし、その要素を x_t^i とかく。また、探索点は逐次移動し（いわゆる世代交代）その移動量を $\mathbf{v}_t^i \in R^D$ 、その要素を v_t^i と表す。添え字の t は、移動のステップ数（世代数）である。なお、ベクトルの要素には、次元に対応する添え字がつくことになるが、ここでは表記を簡便にするため省略している。

いま、以下のようなモデルを考える。

$$v_{t+1}^i = \omega v_t^i + \sum_{j \in \Omega_i} h(\mathbf{x}_t^i, \mathbf{x}_t^j) + g^i(\mathbf{x}_t^i), \quad (1)$$

$$\mathbf{x}_{t+1}^i = \mathbf{x}_t^i + v_{t+1}^i + \sigma \xi_t^i, \quad (2)$$

ここで、 $h(\cdot, \cdot)$ は、探索点間の相互作用に対応する関数であり、 Ω_i は、 i 番目の探索点と相互作用する探索点の集合を規定している。また、 $g^i(\mathbf{x}_t^i)$ は、 \mathbf{x}_t^i における勾配の推定を与えるものとする。(1)の第1項はPSOに含まれる慣性項であり、(2)は位置更新であるが、FAなどに準じて、ランダムウォークの項 $\sigma \xi_t^i$ を想定した形式とする。ただし、本稿の実験では、簡単のため $\sigma = 0, \omega = 0$ のケースを扱っている。

ここで、具体的な関数として、2つの探索点間の距離に応じた反発に対応する

$$h(\mathbf{x}_t^i, \mathbf{x}_t^j) = \alpha e^{-d \|\mathbf{x}_t^i - \mathbf{x}_t^j\|} \frac{x_t^i - x_t^j}{\|\mathbf{x}_t^i - \mathbf{x}_t^j\|}. \quad (3)$$

を取り上げる。2つのパラメータ α と d は、それぞれ、反発の大きさと範囲に関わるものであり、 α が大きいほど強い反発を、 d が大きいほど狭い範囲で反発することとなる。 $\frac{x_t^i - x_t^j}{\|\mathbf{x}_t^i - \mathbf{x}_t^j\|}$ は正規化し向きを与えるための項となっている。

また、勾配の推定には、同時摂動を利用する場合を考え、簡便なベルヌーイ分布を用い、 \mathbf{x}_t^i における勾配の推定値を

$$g^i(\mathbf{x}_t^i) = \gamma \frac{f(\mathbf{x}_t^i + c\mathbf{s}^i) - f(\mathbf{x}_t^i - c\mathbf{s}^i)}{2c} \mathbf{s}^i, \quad (4)$$

として与えることとする¹⁴⁾。ただし、 \mathbf{s}^i はベルヌーイ分布に従う乱数、 \mathbf{s}^i はそのベクトルを表し、 c は小さい正の定数である。なお、以下の数値例では、 $c = 1$ としている。同時摂動は、本稿では2次元の数値例を示しているが、高次元になっても関数の観測回数を増加させることなく、局所的な勾配情報を効率的に与えることができることが知られている。なお、目的関数 $f(\cdot)$ を2回計算するため、通常の進化計算や群知能のモデルでの1個体1ステップあたりの倍の目的関数を計算する必要

があることには注意が必要である。また、 α と γ は2つの作用のバランスを定めるパラメータに対応する。

4 数値例

3章で示したモデルが関数最適化においてどのような振る舞いを示すか、Sphere 関数

$$f(x) = \|\mathbf{x}\|^2 \quad (5)$$

と Double cone 関数

$$f(x) = \sum_{k=1}^2 \left(1 - \frac{2}{\|\mathbf{x} - \mathbf{b}_k\| + 1} \right) \quad (6)$$

に対して、幾通りかのパラメータの組に対して数値計算を行った。探索点の個数は30として、目的関数の次元は挙動を直感的に理解しやすい2次元としている。なお、 $\mathbf{b}_1 = [0, 0]^T$ と $\mathbf{b}_2 = [3, 3]^T$ とした。Double cone 関数の極小値は、 $\mathbf{x} = [0, 0]^T, [3, 3]^T$ の近くに存在する設定となっている。

Fig.1 に Sphere 関数において、(3), (4) 式のパラメータを $d = 1, \gamma = 1$ とし、 $\alpha = 1, 10, 50$ と変化させた場合の探索点の挙動の一例を示す。初期配置は緑の点で表しており、 $x_i \in [-5, 5]$ の区間に一様に分布させている。探索点は極小値を与える $[0, 0]^T$ の周囲へ移動するが、 α が大きいほど反発が大きいため広く分布する。Fig. 2 では、初期配置を領域の左下に偏らせた場合の振る舞いであり、最終ステップでは Fig.1 と同様の範囲に移動することがわかる。

Fig.3 と Fig.4 に、同様の実験を Double cone 関数に対して実行した場合の結果の一例を示す。ここでは、(3), (4) 式のパラメータは、 $d = 1, \gamma = 5$ とし、 $\alpha = 0.01, 0.1, 0.2$ としている。Fig.3 では、おおむね近い方の極小値に探索点が分かれて収束する様子が示され、Sphere 関数の場合と同様に、各々の極小値の周辺では、反発の大きさに応じた範囲に広がっている。Fig.4 では、領域の左下から近い方の極小値への勾配に沿って移動し、反発が大きい場合には、その影響によって集団が2つに分離し他方の極小値にも探索点が集まること示されている。

Fig.5 に横軸に繰り返しの回数、縦軸に各探索点の x_1 をプロットした結果を示す。反発に関するパラメータ α の値に応じて、 $x_1 = 0$ の局所解から離れていく様子が示されている。

簡単のため、2次元の目的関数の場合の紹介に留めた。また、慣性項とランダムウォーク項の作用がない場合 ($\omega = 0, \sigma = 0$) の場合の数値計算の結果を示しているが、発表の際にはこれらの影響についても議論を行いたい。

5 おわりに

本稿では、探索点間の相互作用に反発項をもち、同時摂動によって勾配方向を推定して探索を行う探索点の集団の挙動を示した。勾配の推定は局所的な簡易な方法をとっているが、2つの作用すなわち、反発と勾配方向への集中のバランスから観察される集団の挙動にはさまざまなパターンが現れることがわかる。

反発以外の他の作用をもつモデルの検討や、勾配の推定の方法が異なるモデルについても今後は検討を進め

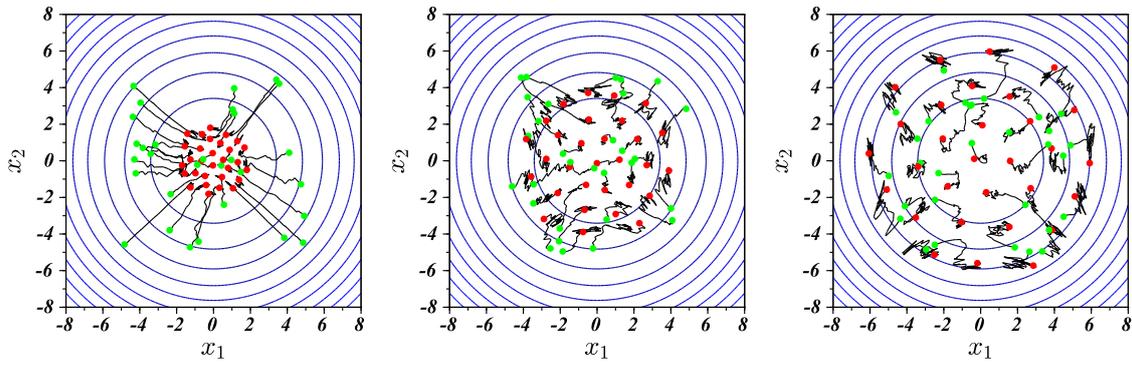


Fig. 1: Sample trajectories of search points for Sphere function for $\alpha = 1$, $\alpha = 10$ and $\alpha = 50$. Green dots represent initial positions of search points and red dots represent terminated positions.

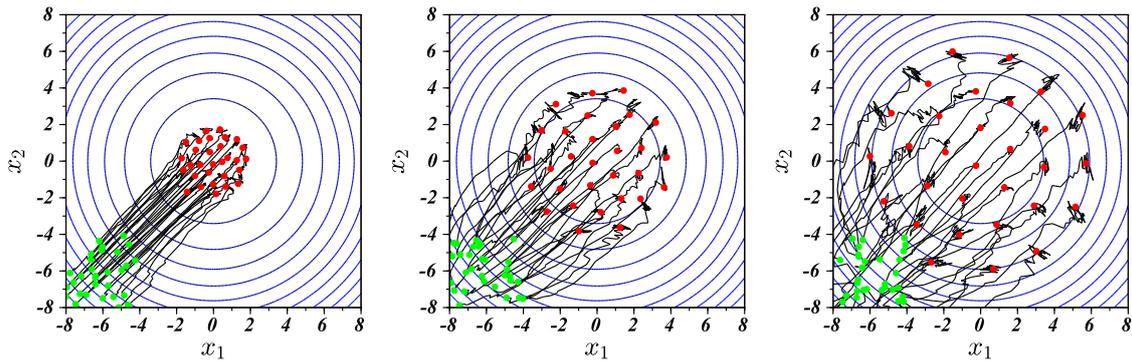


Fig. 2: Sample trajectories of search points for Sphere function for $\alpha = 1$, $\alpha = 10$ and $\alpha = 50$.

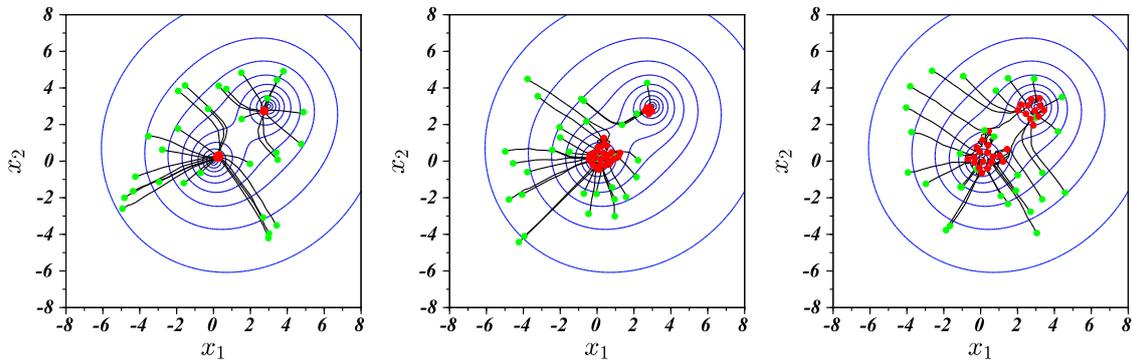


Fig. 3: Sample trajectories of search points for Double cone function $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.2$. There are two local optima $(0,0)$ and $(3,3)$.

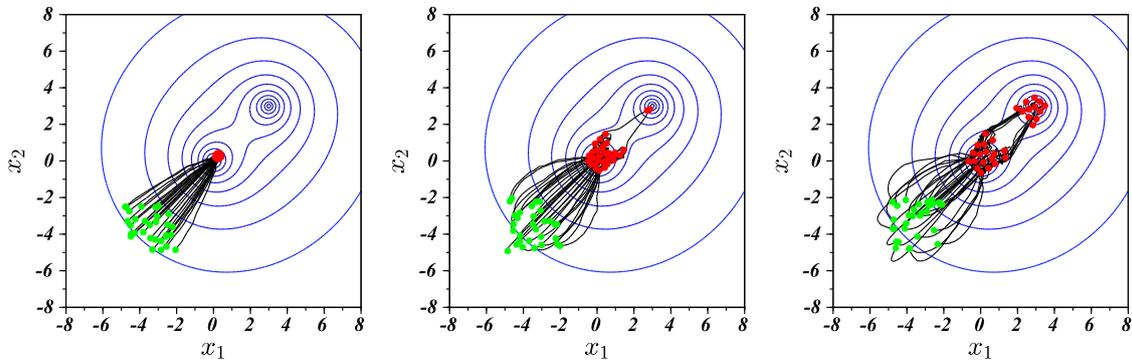


Fig. 4: Sample trajectories of search points for Double cone function $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.2$

ていく予定である。特に、同時摂動は局所的な関数形状の近似であるため、離れた探索点の情報を使う大域的な勾配の推定法を取り入れることが必要であると考えている。今後は、これらについても検討を進めていくことを予定しており、パラメータやオペレータを操作して、exploration と exploitation のバランス¹⁷⁾あるいは、大域的探索と局所探索のバランスにはさまざまなアプローチがある一方で、集中と分散をはかるメカニズムからアルゴリズムを構成することへの展開をはかっていく予定である。

謝辞

本研究の一部は、JPSS 科研費 15K0038 による助成を受けた。ここに謝意を表する。

参考文献

- 1) Kennedy, J., Eberhart, R. C., Shi, Y.: Swarm intelligence. Morgan Kaufmann, (2001).
- 2) Yang, X-S.: Nature-inspired metaheuristic algorithms. Luniver press, (2010).
- 3) Kennedy J., Eberhart, R. C.: Particle swarm optimization. In Proceedings of IEEE International Conference on Neural Networks, 4, 1942–1948 (1995).
- 4) Yang, X-S.: Firefly algorithms for multimodal optimization. Lecture Notes Computer Science 5792, Springer, 169–178 (2009).
- 5) Yang, X-S., Deb, S.: Engineering optimisation by cuckoo search. International Journal of Mathematical

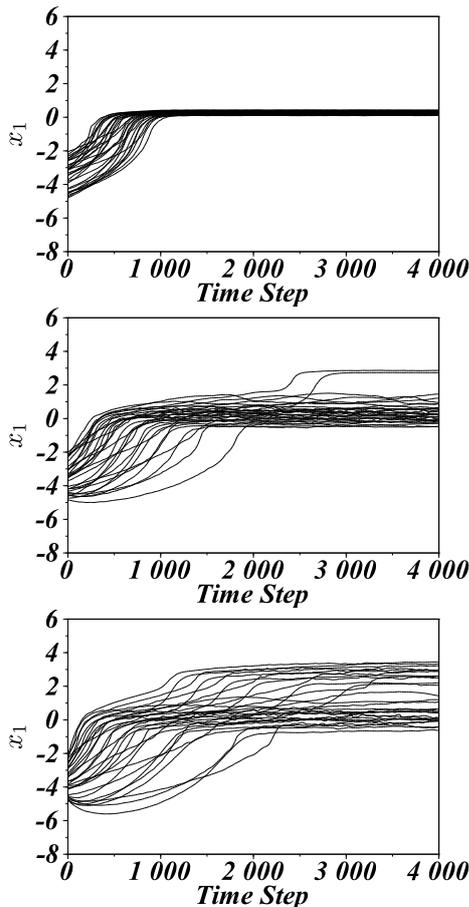


Fig. 5: x_1 coordinate of particles at time steps $N = 4000$ for Double cone function. The initial positions are chosen from $[-5, -2]^2$.

- Modelling and Numerical Optimisation, 1, 330–343 (2010).
- 6) M. Dorigo, and L. Gambardella, “Ant Colony Systems: A Cooperative Learning Approach to the Traveling Salesman Problem,” *IEEE Transactions on Evolutionary Computation*, Vol. 1, No. 1, pp 53–66, (1997)
- 7) Dervis Karaboga, Bahriye Basturk, “A powerful and efficient algorithm for numerical function optimization: artificial bee colony (ABC) algorithm,” *Journal of Global Optimization*, Vol. 39, No. 3, pp.459–471, (2007)
- 8) Passino, K.M., “Biomimicry of bacterial foraging for distributed optimization and control,” *IEEE Control Systems*, Vol.—22, No. 3, pp. 52–67, (2002)
- 9) Kaveh, A., Talatahari, S.: A novel heuristic optimization method: charged system search. *Acta Mechanica*, 213, 267–289 (2010).
- 10) Rashedi, E., Nezamabadi-pour, H., Saryazdi, S.: GSA: a gravitational search algorithm. *Information sciences*, 179, 2232–2248 (2009).
- 11) T. Uchitane, T. V. Ton and A. Yagi, “An ordinary differential equation model for fish schooling,” *Scientiae Mathematicae Japonicae*, (2013)
- 12) Uchitane, T., Yagi, A.: Optimization scheme based on differential equation model for animal swarming. *Scientific Research Publishing* 2, 45–51 (2013).
- 13) Craig W. Reynolds, “Flocks, Herds, and Schools: A Distributed Behavioral Model, in *Computer Graphics*,” *Proceedings of the 14th annual conference on Computer graphics and interactive techniques*, pp. 25–34, (1987)
- 14) 前田裕, 同時摂動型最適化法とその応用, システム/制御/情報, Vol. 52. No. 2, pp. 47–53, (2008)
- 15) Yang, X-S., Deb, S., Thomas H., and Xingshi. H.: Attraction and diffusion in nature-inspired optimization algorithms. *Neural Computing and Applications*, 1–8 (2015).
- 16) Tan, K. C., Chaim, S. C., Mamun, A. A., Goh, C. K.: Balancing exploration and exploitation with adaptive variation for evolutionary multi-objective optimization. *European Journal of Operational Research*, 197, 701–713 (2009).
- 17) Črepinšek, M., Liu, S.-H., and Mernik, M.: “Exploration and exploitation in evolutionary algorithms: A survey,” *ACM Computing Surveys*, Vol.45, No.3, pp.35.1–35.33, (2013)
- 18) 田邊遼司, 串田淳一, 畠中利治: 関数最適化における進化計算, 計測と制御, vol. 54, no. 8, pp. 567–572, (2015)

学習データの分布に基づいた楕円形基底関数を用いたラジアル基底関数ネットワーク

○杉浦宏樹 岡本卓 小坏成一 (千葉大学)

Radial basis function networks with elliptical basis functions based on the distribution of the learning data

*H. Sugiura, T. Okamoto, and S. Koakutsu (Chiba University)

Abstract This study focuses on the radial basis function (RBF) networks which can implement the regression for continuous inputs and outputs. The RBF Networks is an artificial neural networks with three layers. It learns centers and radii of activating functions called radial basis function and weights between the hidden layer and the output layer to work as a suitable regressor. The shape of the basis function of the conventional RBF networks is circle; hence, there are some regions that the basis functions cannot cover well in training data, and thereby the regression capability can deteriorate in the regions. This study proposes a new RBF networks with elliptical basis functions to improve the regression capability. In the proposed method, the elliptical basis functions which adequately cover the training data are derived by using the clustering result for the training data. The effectiveness of the proposed method is confirmed through an application to a multi-modal function regression problem with noisy and unevenly-distributed training data.

Key Words: Radial basis function networks, Machine learning, Clustering, Gaussian mixture model

1 はじめに

近年の情報化社会では、大量の情報を限られた時間で人間に変わった処理する技術が必要とされ、そのための識別・認識・関数近似を自動的に実現する技術として、機械学習が注目されている。

本研究では、機械学習器の中でも、連続的な入出力に関する情報処理を高速に実行できるラジアル基底関数ネットワーク（以降では、RBF ネットワークとよぶ）に注目する^{1, 2, 3, 4}。RBF ネットワークは、3層のニューラルネットワークの一種であり、中間層活性化関数の中心と半径及びRBF ネットワークの中間層から出力層への重みを学習（最適化）することで関数近似器として動作する。従来のRBF ネットワークでは基底関数の形状は円形であり、学習データ内に、基底関数がうまく覆えない領域が存在し、この領域においては回帰性能が低下する可能性がある。

本研究では、上記の問題を解決するために、学習データのクラスタリング結果に基づき、学習データを過不足なく網羅することのできる楕円形の基底関数を導出し、この基底関数を用いて学習を行うことで、回帰性能を改善する手法を提案する。

提案手法では、RBF ネットワークの学習の前処理として、k-means 法⁵または混合ガウスモデル法^{6, 7}による学習データのクラスタリングと代表ベクトルの抽出を行い、基底関数の中心として採用するサンプルの数を減少させる。つぎに、クラスタリングにk-means法を用いた場合は、学習データのクラスタリング結果に主成分分析⁷を適用し、その結果を用いて2次形式の主軸変換定理に基づいてラジアル基底関数を楕円化

することで、各クラスタを適切に表現可能な基底関数を導出する。ガウス混合モデル法を用いた場合は、各混合要素の平均と共分散を各基底関数の平均と共分散として用いることで、各クラスタを適切に表現可能な基底関数を導出する。これらの基底関数を用いてRBF ネットワークの学習を行うことで、回帰性能の改善を図る。

分布に偏りがあり、かつ真の出力値にノイズが加えられている学習データを用いた多峰性関数回帰問題を用いた計算機実験を通して、提案手法の有効性を検証する。

2 ラジアル基底関数ネットワーク

ラジアル基底関数ネットワーク (RBFN) は、教師あり学習によって回帰を行うニューラルネットワークの一種である。RBF ネットワークの学習は、ガウス関数の計算、行列の和積および逆行列の計算のみによって行うことが可能であるため、計算が非常に高速である。

本研究では、 L 次元空間のデータ $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^L$ を入力すると、1次元データ $y \in \mathbb{R}$ を出力する学習器を考える。RBF ネットワークでは、ガウス関数を基底関数とした

$$y(\mathbf{x}) = \sum_{m=0}^M w_m \phi_m(\mathbf{x}; \mathbf{v}_m, r_m) \quad (1a)$$

$$\phi_0(\mathbf{x}) = 1 \quad (1b)$$

$$\phi_m(\mathbf{x}) = \exp \left\{ -\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{v}_m)^\top (\mathbf{x} - \mathbf{v}_m)}{2r_m^2} \right\}, \quad m = 1, \dots, M \quad (1c)$$

を用いて出力を決定する。ここで、 w_m , $m = 1, \dots, M$ は各基底関数に対する重みであり、また、 w_0 はサン

ルの目標値のオフセット量を許容するパラメータである。式(1c)は \mathbf{v}_m を中心とするガウス関数であり、 r_m はその半径である。

学習データセットを (\mathbf{x}_p, d_p) , $p = 1, \dots, P$ とすると、RBFネットワークにおける学習問題は、 $\mathbf{v}_m, r_m, m = 1, \dots, M$ が与えられた下で、誤差関数

$$E(\mathbf{w}; \boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P (d_p - y(\mathbf{x}_p))^2 + \frac{1}{2} \sum_{m=0}^M \lambda_m w_m^2 \quad (2)$$

を \mathbf{w} について最小化する問題として与えられ、その解 \mathbf{w}^* は

$$\mathbf{w}^* = (\Phi^\top \Phi + \Lambda)^{-1} \Phi^\top \mathbf{d} \quad (3a)$$

$$\text{where } \Phi = \begin{bmatrix} 1 & \phi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_M(\mathbf{x}_1) \\ 1 & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_M(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \phi_1(\mathbf{x}_P) & \cdots & \phi_M(\mathbf{x}_P) \end{bmatrix} \quad (3b)$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_M \end{bmatrix} \quad (3c)$$

$$\mathbf{d} = [d_1, d_2, \dots, d_P]^\top \quad (3d)$$

で与えられる。ここで、 $\lambda_m, m = 0, \dots, M$ は、式(3a)の行列 $\Phi^\top \Phi + \Lambda$ の正則性を担保するための定数である。

学習データセットの教師値にノイズが含まれると想定される場合、ラジアル基底関数の中心 $\mathbf{v}_m, m = 1, \dots, M$ と半径 $r_m, m = 1, \dots, M$ の設定方法としては、基底関数の数 M を学習データの数 P よりも小さくし、k-means法等のクラスタリング法を用いて、それらの中心 \mathbf{v}_m を学習データセットから探索することが経験的に良いとされる⁷⁾。半径 r_m については、

$$r_m = \frac{d_{m,\max}}{\sqrt{L} \sqrt{M-1}}, \quad m = 1, \dots, M \quad (4)$$

とする方法が推奨されている⁸⁾。ここで、 $d_{m,\max}$ は、入力空間上で、 m 番目の学習データからもっとも離れた学習データとの距離を表している。

3 2次曲面の主軸変換

L 次元のベクトル $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^L$ に対する任意の2次形式

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L a_{ij} x_i x_j \quad (5)$$

は、実対称行列 $A = (a_{ij})$ を用いて、

$$f(\mathbf{x}) = \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} \quad (6)$$

と表現することができ、

$$f(\mathbf{x}) = 1 \quad (7)$$

は2次超曲面を形成する。一般に、式(7)からその2次超曲面の形状を知ることは困難である。そこで、適当な直交行列 $P = [\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_L]$ を用いて直交変換

$$\mathbf{x} = P \mathbf{z} \quad (8)$$

を行うことで、空間の軸の向きを $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_L$ に取り直す。このとき、

$$\begin{aligned} f(\mathbf{z}) &= \mathbf{z}^\top \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_L) \mathbf{z} \\ &= \sum_{l=1}^L \lambda_l z_l^2 \end{aligned} \quad (9)$$

とでき、これを2次形式の標準形と呼ぶ。式(9)において、 $\lambda_l, l = 1, \dots, L$ は行列 A の固有値で、行列 P は λ_l に対応する A の正規化された固有ベクトルを並べたものである。ここで、 $\boldsymbol{\lambda} > 0$ とすると、

$$f(\mathbf{z}) = 1 \quad (10)$$

は各主軸の大きさが $\lambda_l^{-\frac{1}{2}}, l = 1, \dots, L$ の超楕円体を形成し、式(7)の2次超曲面は、式(10)の超楕円体の主軸を $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_L$ 方向へ傾けたものである⁹⁾。

ところで、式(8)より、

$$\begin{aligned} f(\mathbf{z}) &= \mathbf{z}^\top \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_L) \mathbf{z} \\ &= \mathbf{x}^\top P \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_L) P^\top \mathbf{x} \\ &= \mathbf{x}^\top A \mathbf{x} \end{aligned} \quad (11)$$

であるため、式(6)の A を

$$A = P \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_L) P^\top \quad (12)$$

とすることで、各軸の大きさが $\lambda_l^{-\frac{1}{2}}, l = 1, \dots, L$ で、各軸の方向が $\mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_L$ へ傾いた超楕円体を得ることができる。ここで、

$$r_l = \frac{p_l}{\sqrt{\lambda_l}}, \quad l = 1, \dots, L \quad (13)$$

を主軸ベクトルとよぶことにする。

4 クラスタリング法

提案手法では、学習データセットをクラスタリングし、その結果にもとづいて、RBFNの基底関数を決定する。本研究では、クラスタリング法として、k-means法⁵⁾と混合ガウスモデル法^{6, 7)}を用いる。

4.1 k-means 法

k-means法は、 P 個の入力データ $\mathbf{x}_p, p = 1, \dots, P$ を、適切に代表する K 個の代表ベクトル $\mathbf{v}_k, k = 1, \dots, K$ を求め、この代表ベクトルに入力データを所属させることで、クラスタリングを達成する技術である。k-means法のアルゴリズムは以下の通りである。

k-means 法のアルゴリズム

1. K 個の代表ベクトル $\mathbf{v}_k, k = 1, \dots, K$ を入力データ $\mathbf{x}_p, p = 1, \dots, P$ からランダムに選択する。
2. 各入力データ $\mathbf{x}_p, p = 1, \dots, P$ について、

$$\hat{k}^p = \underset{k}{\text{argmin}} \|\mathbf{x}_p - \mathbf{v}_k\| \quad (14)$$

を算出し、 K 個のクラスタ $C_k = \{p \mid \hat{k}^p = k\}, k = 1, \dots, K$ を形成する。

3. 各クラスタの重心を

$$\mathbf{v}_k^G = \frac{1}{|C_k|} \sum_{p \in C_k} \mathbf{x}_p, \quad k = 1, \dots, K \quad (15)$$

と算出し, $\mathbf{v}_k \leftarrow \mathbf{v}_k^G, k = 1, \dots, K$ とする。ここで, $|C_k|$ は C_k の要素数である。

4. 手順2と手順3の更新により, 代表ベクトル $\mathbf{v}_k, k = 1, \dots, K$ が変化した場合は, 手順2に戻る。そうでなければ, 終了する。

4.2 混合ガウスモデル法

混合ガウスモデルとは, 確率変数 \mathbf{x} から得られた P 個の入力データ $\mathbf{x}_p, p = 1, \dots, P$ が与えられたとき, K 個のガウス分布の重ね合わせにより確率変数 \mathbf{x} の確率分布 $p(\mathbf{x})$ を近似するモデルである。

K 個のガウス分布を

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k) &= \frac{1}{(2\pi)^{L/2} |\Sigma_k|^{1/2}} \times \\ &\exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k)^\top \Sigma_k^{-1} (\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_k) \right\}, \\ &k = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (16)$$

で与える。ここで, $\boldsymbol{\mu}_k$ は k 番目のガウス分布の平均, Σ_k は k 番目のガウス分布の分散共分散行列, $|\Sigma_k|$ は分散共分散行列の行列式である。混合ガウスモデルでは, 確率分布 $p(\mathbf{x})$ を

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k) \quad (17a)$$

$$\text{subject to } \sum_{k=1}^K \pi_k = 1 \quad (17b)$$

$$0 \leq \pi_k \leq 1, k = 1, \dots, K \quad (17c)$$

と表現する。各ガウス分布の平均 $\boldsymbol{\mu}_k$ と分散共分散行列 Σ_k , および混合係数 π_k は, 一般に, 最尤推定法の1つであるEMアルゴリズムを用いて決定される。EMアルゴリズムによる混合ガウスモデルのパラメータ探索アルゴリズムは以下の通りである。

混合ガウスモデルのパラメータ探索アルゴリズム

1. 各ガウス分布の平均 $\boldsymbol{\mu}_k, k = 1, \dots, K$, 分散共分散行列 $\Sigma_k, k = 1, \dots, K$, および混合係数 $\pi_k, k = 1, \dots, K$ を初期化する。入力データセット $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_P\}$ に対する対数尤度を

$$\begin{aligned} \ln p(X | \boldsymbol{\mu}_1, \dots, \boldsymbol{\mu}_K, \Sigma_1, \dots, \Sigma_K, \pi_1, \dots, \pi_K) &= \sum_{p=1}^P \ln \left\{ \sum_{k=1}^K \pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_p; \boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k) \right\} \end{aligned} \quad (18)$$

と算出する。

2. 各入力データの各クラスタに対する負担率を

$$\begin{aligned} \gamma_{pk} &= \frac{\pi_k \mathcal{N}(\mathbf{x}_p; \boldsymbol{\mu}_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j \mathcal{N}(\mathbf{x}_p; \boldsymbol{\mu}_j, \Sigma_j)}, \\ &p = 1, \dots, P, k = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (19)$$

と算出する。

3. パラメータを

$$\boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}} = \frac{1}{P_k} \sum_{p=1}^P \gamma_{pk} \mathbf{x}_p, k = 1, \dots, K \quad (20a)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_k^{\text{new}} &= \\ &\frac{1}{P_k} \sum_{p=1}^P \gamma_{pk} (\mathbf{x}_p - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}}) (\mathbf{x}_p - \boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}})^\top, \\ &k = 1, \dots, K \end{aligned} \quad (20b)$$

$$\pi_k^{\text{new}} = \frac{P_k}{P}, k = 1, \dots, K \quad (20c)$$

$$\boldsymbol{\mu}_k \leftarrow \boldsymbol{\mu}_k^{\text{new}}, \Sigma_k \leftarrow \Sigma_k^{\text{new}}, \pi_k \leftarrow \pi_k^{\text{new}}, k = 1, \dots, K \quad (20d)$$

$$\text{where } P_k = \sum_{p=1}^P \gamma_{pk} \quad (20e)$$

と更新する。

4. 式(18)を用いて対数尤度を更新し, 手順2と手順3の更新による対数尤度の変化量が閾値以下ならば, 終了する。そうでなければ, 手順2に戻る。

手順1におけるパラメータの初期値は, あらかじめ k -means 法によりクラスタを探索し, その結果をもとに初期値を決める方法が推奨されている⁷⁾。平均 $\boldsymbol{\mu}_k, k = 1, \dots, K$ の初期値については各クラスタの平均, 分散共分散行列 $\Sigma_k, k = 1, \dots, K$ については各クラスタの分散共分散行列, 混合係数 $\pi_k, k = 1, \dots, K$ については各クラスタに属するサンプルの割合を用いる。

混合ガウスモデルによるクラスタリングでは, 各入力データ $\mathbf{x}_p, p = 1, \dots, P$ について, $\hat{k}^p = \underset{k}{\operatorname{argmin}} \gamma_{pk}$ を算出し, K 個のクラスタ $C_k = \{p \mid \hat{k}^p = k\}, k = 1, \dots, K$ を形成する。

5 提案手法

5.1 楕円形ラジアル基底関数を用いた RBF ネットワークの構築

従来のRBFネットワークでは, 基底関数の形状が円形であるため, 学習データ内に, 基底関数が上手く覆えない領域が存在し, この領域においては回帰性能が低下する可能性がある。そこで, 本研究では, 回帰性能の向上を目的として, 楕円形の基底関数

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{x}; \mathbf{v}_m, A_m) &= \exp \left\{ -\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{v}_m)^\top A_m^{-1} (\mathbf{x} - \mathbf{v}_m) \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

を導入する。この楕円形基底関数の行列 A_m の学習問題を誤差関数(2)の最小化問題とすると, この問題は解析的に解くことができず, 任意の最適化手法を適用することを考えても, パラメータの数が $\mathcal{O}(M^2)$ で増加するため, 計算コストが非常に増大することが予想される。本研究で提案する手法では, 楕円形の基底関数を学習データを前処理した結果から導出することで, 計算コストの増大を抑制しつつ近似性能の向上を図る。

3節で説明した2次元の主軸変換に基づき、所望の超楕円体の主軸ベクトル $\mathbf{r}_{lm} = \|\mathbf{r}_{lm}\| \mathbf{u}_{lm}$, $l = 1, \dots, L$ を用いて、式(21)の行列 A_m^{-1} を

$$A_m^{-1} = Q_m \text{diag} \left(\frac{1}{\|\mathbf{r}_{1m}\|^2}, \dots, \frac{1}{\|\mathbf{r}_{Lm}\|^2} \right) Q_m^\top \quad (22a)$$

$$\text{where } Q_m = [\mathbf{u}_{1m}, \dots, \mathbf{u}_{Lm}] \quad (22b)$$

と与える。ただし、 \mathbf{u}_{lm} , $l = 1, \dots, L$ は主軸ベクトルの方向を表す単位ベクトルである。式(1c)の半径 r_m の情報は行列 A_m に含めているため、従来手法におけるラジアル基底関数の半径決定の手順が、各基底関数の広がりを表す超楕円体の主軸の方向と大きさを決定する手順となる。以降では、各クラスタリング法を用いた場合の主軸の方向と大きさ、すなわち行列 A_m^{-1} の決定法について述べる。

5.2 k-means 法と主成分分析を用いた方法

各ラジアル基底関数の広がりを表す超楕円体は、各ラジアル基底関数の中心 \mathbf{v}_m に対応する m 番目のクラスタに属する学習データ \mathbf{x}_{pm} , $p = 1, \dots, P_m$ をできる限り覆うように構成する。まず、入力データのと次元 (L 次元) への主成分分析⁷⁾を用いて、学習データ \mathbf{x}_{pm} , $p = 1, \dots, P_m$ の分散を最大化するように主軸の方向 $\mathbf{u}_{1m}, \dots, \mathbf{u}_{Lm}$ を選ぶ。各主軸の大きさ $\|\mathbf{r}_{lm}\|$, $l = 1, \dots, L$ については、学習データ \mathbf{x}_{pm} , $p = 1, \dots, P_m$ の各種軸方向に対する標準偏差 σ_{lm} , $l = 1, \dots, L$ の定数 $\alpha (> 0)$ 倍とする。

5.3 混合ガウスモデル法

混合ガウスモデル法により学習データのクラスタリングを行った場合、各クラスタを適切に表現可能な分散共分散行列が Σ_m , $m = 1, \dots, M$ として得られるため、これを対応する基底関数の行列 A_m , $m = 1, \dots, M$ として用いる。その上で、k-means 法を用いた場合と同様に、各基底関数の広がりを表す超楕円体の主軸を定数 α 倍する。実装上は、 Σ_m を α^{-2} 倍した行列を対応する基底関数の行列 A_m とする。

6 数値実験

提案手法と従来手法および回帰モデルの1つであるサポートベクトル回帰 (SVR)¹⁰⁾ を Six-hump Camelback 関数回帰問題に適用し、提案手法の有効性を検証する。

6.1 問題設定

この問題では、Six-hump Camelback 関数⁴⁾ (以下 SHC 関数とする)

$$f(\mathbf{x}) = \left(4 - 2.1x_1^2 + \frac{1}{3}x_1^4 \right) x_1^2 + x_1x_2 + (-4 + 4x_2^2)x_2^2 \quad (23a)$$

$$\text{where } -2 < x_1 < 2, -1 < x_2 < 1 \quad (23b)$$

の回帰を目的とする。ところで、回帰問題で扱うテーマの1つとして、アイテムの特徴量を入力とした人の嗜好の学習¹¹⁾があげられる。このテーマにおいては、

一般的に、特徴量空間の中でも予測対象者の嗜好が強い部分に多くの学習データが得られると仮定できる。本研究では、SHC 関数回帰問題を嗜好予測問題の例題としてとらえ、関数値 $f(\mathbf{x})$ の値の小ささと人の嗜好の強さを関連付けて、関数値 $f(\mathbf{x})$ が小さい部分により多くの学習データが配置されるように、学習データ \mathbf{x}_p , $p = 1, \dots, P$ は、次の1100点とした。

- x_1 方向の標準偏差を 0.2, x_2 方向の標準偏差を 0.12 とする正規分布に従い、中心を $(-0.08984, 0.71266)$ として 250 点, 中心を $(0.08984, -0.71266)$ として 250 点。
- x_1 方向の標準偏差を 0.1, x_2 方向の標準偏差を 0.06 とする正規分布に従い、中心を $(-1.70361, 0.79068)$ として 50 点, 中心を $(1.70361, -0.79068)$ として 50 点。
- $-0.41 < x, y < 0.41$ 内の一様分布に従うように 250 点。
- 定義域全体 $-2.0 < x < 2.0$, $-1.0 < y < 1.0$ 内の一様分布に従うように 250 点。

教師値 d_p は、学習サンプル \mathbf{x}_p の応答値の集合 $f(\mathbf{x}_p)$, $p = 1, \dots, P$ を $[0, 1]$ で正規化し、これに中心 0, 標準偏差 0.2 の正規分布によるノイズを加え、正規化に用いた変換の逆変換したものを教師値 d_p として与える。

6.2 実験方法と性能評価

ラジアル基底関数の中心を k-means 法を用いて決定し、従来の円形基底関数を用いる手法を従来手法とし、5.2節で説明した方法で生成した楕円形基底関数を用いる方法を提案手法1とする。ラジアル基底関数の中心を混合ガウスモデル法を用いて決定し、5.3節で説明した方法で生成した楕円形基底関数を用いる方法を提案手法2とする。

各手法のハイパーパラメータは各手法の近似性能が最も良くなるようにグリッドサーチを行って決定した。その結果、提案手法1の半径の調整係数 α を $\alpha = 4.5$ とし、提案手法2の半径の調整係数を $\alpha = 3.0$ とした。各手法におけるクラスタ数はすべて $K = 25$ とし、RBF ネットワーク学習問題の定数 λ については、従来手法、提案手法1、提案手法2のすべてで $\lambda = \mathbf{0}$ とした。従来手法と提案手法1で用いる k-means 法は Python の scikit-learn¹²⁾ の sklearn.cluster.KMeans モジュールを用いて実装し、提案手法2で用いる混合ガウスモデル法は sklearn.mixture.GMM モジュールを用いて実装した。SVR は Python の scikit-learn の sklearn.svm.SVR モジュールを用いて実装し、コストパラメータ C と不感パラメータ ϵ を $C = 100000$, $\epsilon = 0.4$ とした。カーネルとしてはガウシアンカーネルを採用し、カーネルの広がりを表すパラメータ γ を $\gamma = 0.1$ とした。

各手法により得られた回帰関数の評価指標として、近似性能 E を定義する。近似性能 E は、回帰関数と真の

Table 1: Results for the six-hump camelback function approximation problem. C. M. stands for conventional method. P. M. stands for proposed method.

Method	E_2	Learning time [ms]	Evaluation time [s]
C. M.	0.3865	23.32	2.077
P. M. 1	0.3784	25.80	2.380
P. M. 2	0.3418	436.90	2.468
SVR	0.3308	7121.00	26.330

関数との単位超空間あたりの自乗誤差の平方根として、

$$E_2 = \left(\frac{1}{\prod_{l=1}^L (x_l^u - x_l^l)} \times \int_{x_1^l}^{x_1^u} \cdots \int_{x_L^l}^{x_L^u} (f(\mathbf{x}) - y(\mathbf{x}))^2 dx_1 \cdots dx_L \right)^{1/2} \quad (24)$$

と定義する。 E_2 が 0 に近いほど、回帰関数による曲面が真の関数に近いことを表す。ここで、式 (24) の積分を解析的に計算するのは困難である。本研究では、各変数方向に Δx_l , $l = 1, \dots, L$ の間隔で格子状に点をサンプルし、サンプル点での自乗誤差の合計にステップ幅の積 $\Delta x_1 \cdots \Delta x_L$ を乗じて、近似的に式 (24) の積分値を得る。本研究では、 $\Delta x_1 = 0.004$, $\Delta x_2 = 0.002$ として、合計 1,000,000 点で自乗誤差を算出し、 E_2 の近似値を得た。

すべての実験で用いた計算機環境は以下の通りである — OS: Windows 7 Home Premium, CPU: Core i7-2670QM 2.20GHz, RAM: 16.0GB, 開発言語: Python 2.7.11。

6.3 実験結果

各手法を 100 試行して得られた結果の平均値を表 1 に示す。Learning time は、従来手法、提案手法についてはクラスタリングを含めた学習全体に要した時間である。Evaluation time は、 E_2 を算出するための 1,000,000 点の総評価時間であり、生成した機械学習器の動作の軽快さを表す指標である。

提案手法を従来手法と比較すると、近似性能が改善していることがわかる。Evaluation time については、従来手法と比較して大きくなったが、これは基底関数での行列演算が原因であると考えられる。Learning time については、提案手法 2 が従来手法よりも大きくなっている。これは、混合ガウスモデル法のパラメータ探索アルゴリズムで、1 ステップごとに実行する各混合要素の分散共分散行列の演算が原因であると考えられる。つぎに、提案手法と SVR と比較すると、SVR は近似性能は提案手法より少し優れているが、Learning time と Evaluation time がかなり大きくなっている。SVR の学習の結果、サポートベクトルが多くなり、計算コストが増大したと考えられる。

7 おわりに

本研究では、RBF ネットワークにおける近似性能の向上を目的として、学習データのクラスタリング結果

から各クラスタを適切に表現可能な基底関数を導出し、これを用いて RBF ネットワークを構築する手法を提案した。数値実験を通して、提案手法の有効性を検証した。今後の課題として、クラスタ数 K を自動で決定する方法の開発などがあげられる。

謝辞

本研究は JSPS 科研費 16K00324 の助成を受けたものである。

参考文献

- 1) M. J. D. Powell: Radial basis functions for multi-variable interpolation: a review, in Algorithms for Approximation, Clarendon Press, 143/167 (1987)
- 2) T. Poggio and F. Girosi: Networks for Approximation and Learning, Proc. of the IEEE, **78-9**, 1481/1497 (1990)
- 3) 志水清孝: ニューラルネットと制御, コロナ社 (2002)
- 4) 相吉, 岡本, 安田: 最適化手法の基礎 — 力学モデルによる理解と実装, 森北出版 (2014)
- 5) 神鷲敏弘: データマイニング分野のクラスタリング手法 (1) — クラスタリングを使ってみよう!, 人工知能学会誌, **18-1**, 59/65 (2003)
- 6) ビショップ 著, 元田, 栗田, 樋口, 松本, 村田 監訳: パターン認識と機械学習 (上) — ベイズ理論による統計的予測, シュプリンガー・ジャパン (2007)
- 7) ビショップ 著, 元田, 栗田, 樋口, 松本, 村田 監訳: パターン認識と機械学習 (下) — ベイズ理論による統計的予測, シュプリンガー・ジャパン (2008)
- 8) 北山, 荒川, 山崎: RBF ネットワークによる逐次近似最適化 — サンプル点の基礎的検討, 日本機械学会文集 C 編, **76-768**, 1978/1987 (2010)
- 9) 甘利, 金谷: 理工学者が書いた数学の本 — 線形代数, 講談社 (1987)
- 10) 竹内, 烏山: 機械学習プロフェッショナルシリーズ — サポートベクトルマシン, 講談社サイエンティフィク (2015)
- 11) 渡辺, 岡本: アイテムリコメンドシステム, 特願 2015-185334 (2015)
- 12) F. Pedregosa, et al.: Scikit-learn: Machine learning in Python, Journal of Machine Learning Research, **12**, 2825/2830 (2011)

Vision-based Docking Simulation of Underwater Vehicle Using Stereo Vision under Dynamic Light Environment

○ Myo Myint, Kenta Yonemori, Khin Nwe Lwin, Naoki Mukada, Mamoru Minami, Takayuki Matsuno (Okayama University), and Akira Yanou (Kawasaki College of Allied Health Professions)

Abstract– This paper presents a visual-based docking simulation for autonomous underwater vehicle (AUV) under unknown environment that offers huge challenges for visual servoing. For relative pose estimation in real-time, model-based recognition approach is applied using two cameras and 3D marker. Real-time Multi-step Genetic Algorithm (GA) is utilized to evaluate the gene candidates which represent relative poses until getting the best gene with the most trustful pose. The proposed system is implemented in PC, and the Remotely Operated Vehicle (ROV) is tethered through the cable with 200 m length to receive image information and control signals. We conducted experiments in simulated environment in which light is changing dynamically to confirm whether the proposed system can operate docking task under unknown environment. Experimental results showed that docking operation under unknown lighting environment was completed successfully by only mean of virtual servoing using proposed system following designed docking strategy with promising effectiveness.

Key Words: Visual servoing, Underwater vehicle, Docking experiments, Dynamic light environment

1 Introduction

Nowadays, docking operation has become very essential in advanced applications such as underwater batteries recharging, up loading and downloading data, sleeping under a mother ship, and doing some tasks in a vehicle-manipulator system. Generally, there are three phases in docking operation. They are long distance navigation, approaching and docking. Among them, docking step is a critical capability for autonomous underwater vehicle especially when a docking station is unidirectional one that has a single angle for entry. There are many studies on the docking system using various homing sensors ¹⁾⁻³⁾ and techniques ⁴⁾⁻⁶⁾ for the underwater robots. Different kinds of sensors such as global navigation satellite system (GNSS), inertial navigation system (INS) and acoustic sensor have been used for vehicle localization. In spite of expensive navigation sensor suit and large scale dead reckoning sensors being used to provide accurate position data, the final approach of docking process especially for unidirectional docking station is still a difficult task. Recently, a vision-based system has been highlighted as a promising navigation system due to the progress in computer vision. With this motivation, we have developed vision based docking system for unidirectional docking station.

However, one of the challenging problems to be solved for vision-based systems in unknown environment is illumination variation. There are few studies with discussion on the problems of illumination variation for underwater vehicles especially for docking applications. To achieve docking process with adaptability to illumination variation, therefore, we have developed vision-based docking system with light adaptation system for dynamic light environment.

The structure of this paper is as follow. Section

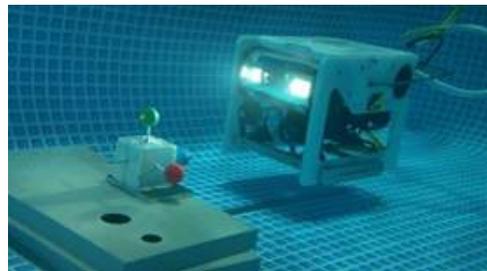


Fig. 1: Underwater vehicle and 3D marker.

II describes concepts and the structure of proposed docking system for underwater vehicle. Experimental results to assess the performance of the proposed system are described in Section III with discussion. The final section concludes the paper.

2 Proposed Docking System

2.1 Visual Servoing System

Fig.2 shows the block diagram of proposed visual servoing system using two cameras. 3D marker consists of three balls with red, green and blue color. In this system, series of images with video frame rate of 33 ms captured by the dual-eye cameras installed on underwater vehicle are sent to the PCI interface unit in PC through the cable. Real-time relative pose of underwater vehicle is estimated using 3D model-based pose estimation algorithm. Then, based on the error between estimated and desired pose, the 3D motion controller outputs voltage signals as the feedbacks to control the vehicle in desired pose. The control parameters for the ROV are x_d [mm], y_d [mm], z_d [mm] and ϵ_{3d} [deg].

2.2 Model-based recognition using real-time Multi-Step GA

3D model-based recognition based on 3D to 2D projection is utilized to estimate relative pose between

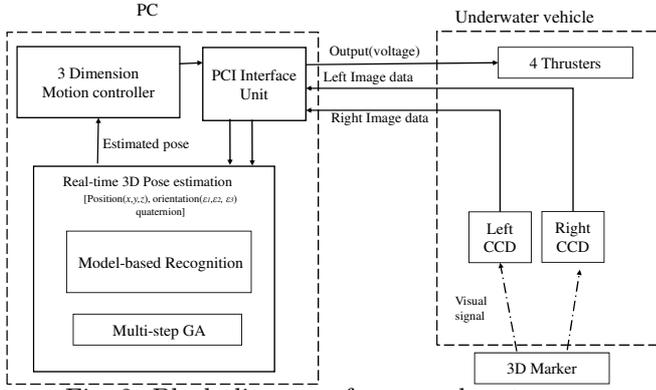


Fig. 2: Block diagram of proposed system.

vehicle and 3D marker. Knowing the information of the target and predefined relative pose to the ROV, the solid model of the target is predefined in computer system and projected to 2D images. Then the desired pose relationship is established by comparing the virtual projected images and the captured ones.

Fig.3 shows Model-based recognition system using dual-eyes vision system. Models representative to six pose parameters; $(x, y, z, \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3)$, where the (x, y, z) is position in Cartesian coordinate frame and the $(\epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3)$ shows the orientation defined by quaternion, encoded by 12 bit each are initiated randomly. The model that has the highest matching degree with target represents the estimated relative pose.

Therefore, the problem of pose recognition addresses to the searching problem. The solution is GA with promising speed and accuracy of performance. According to the performance in time-domain, GA is selected and modified as real-time Multi-step GA in this work even though there are advanced optimized techniques. Detail discussion about real-time Multi-step GA is explained in ¹⁴⁾.

2.3 Docking Simulation

There are three steps in proposed docking operation. In approach step, the vehicle will approach to docking station until the 3D marker is detected. However, according to the space of indoor pool in this experiment, we implemented approach step just to control the vehicle to go forward and detect the 3D marker. After detecting the 3D marker with minimum fitness value that is 0.6 in this experiment, visual servoing step is performed to control the vehicle

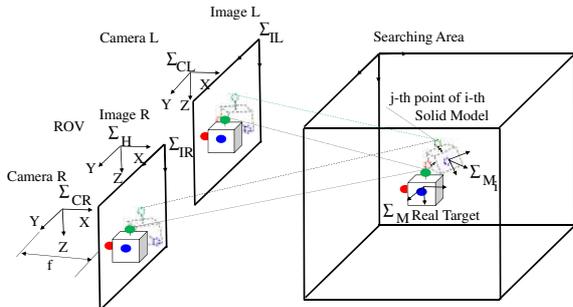


Fig. 3: Model-based recognition system using dual-eyes vision system.

to be regulated in desired pose $(x_d = 600 \text{ mm}, y_d = 0 \text{ mm}, z_d = -67 \text{ mm}, \epsilon_{3d} = 0 \text{ deg})$. To transit to docking step, we set up allowance error level to check whether the vehicle is in suitable pose to make docking. There are two checking criteria before docking. Firstly, the vehicle has to stable with defined tolerance of position error in image plane. We defined tolerance of position error to be $\pm 20 \text{ mm}$ because the radius of docking hole is 35 mm . Then, the vehicle has to stable for defined period that is 165 ms in this experiment. When these two conditions are satisfied during visual servoing, the vehicle performs docking process in which the rod attached to the vehicle fit into the docking hole fixed besides 3D marker. Note that switching between docking and visual servoing step based on allowance error makes the docking operation more smoothly with gentle surfacing the dock hole. Due to field of view of camera, the search area is defined as shown in Fig.5.

2.4 Controller

The proposed control system is 4 DoF $(x_d, y_d, \epsilon_{3d}$ and $z_d)$ based on Σ_H against 3D marker (see Fig.5). Controlling rotations around x and y-axes of Σ_H $(\epsilon_{1d}[\text{deg}], \epsilon_{3d}[\text{deg}])$ are neglected because of their self-stability and less effectiveness to ROV's motion in this experiment. Conventional Proportional controller is used to compensate the error between desired pose and recognized one. The control voltages of four thrusters are calculated by the following proportional control laws.

$$v_1 = k_{p1}(x_d - x) + 2.5 \quad (1)$$

$$v_2 = k_{p2}(\epsilon_{3d} - \epsilon_3) + 2.5 \quad (2)$$

$$v_3 = k_{p3}(y_d - y) + 2.5 \quad (3)$$

$$v_4 = k_{p4}(z_d - z) + 2.5 \quad (4)$$

where x_d, y_d, ϵ_{3d} and z_d are desired relative value based on Σ_H against 3D marker (see Fig.5), and v_1, v_3 and v_4 are the voltages for thrust of x-axis, y-axis and z-axis direction respectively. v_2 means the voltage for torque around z-axis.

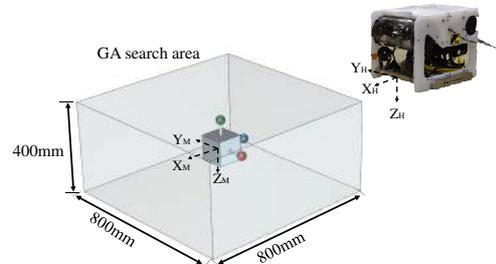


Fig. 5: GA search area.

2.5 ROV as a Test-bed

The ROV shown in Fig. 6 manufactured by Kowa corporation, is used as a main test-bed for proposed

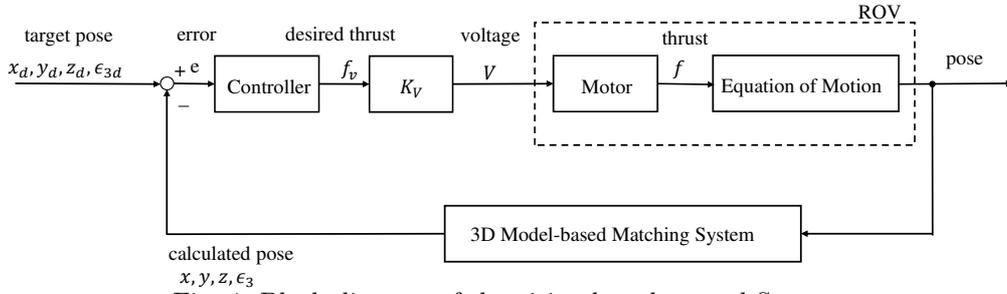


Fig. 4: Block diagram of the vision-based control System.

experiment. Two fixed forward cameras with the same specification (imaging element CCD, pixel number 640×480 , pixel focal length 5 mm, signal system NTSC, minimum illumination 0.8 Lx, no zoom) are mounted on the ROV. The thruster system of the ROV consists of two horizontal thrusters with a maximum thrust of 4.9 N each, one vertical thruster and one lateral thruster with a maximum thrust of 4.9 N each. In addition, the ROV is equipped with two units of LED lights (5.8 W) as the illumination source.

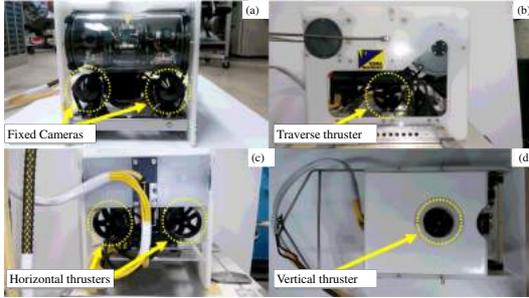


Fig. 6: Overview of ROV (a)Front view (b)Side view (c)Back view (d)Top view.

2.6 Proposed Light Adaptation System

The proposed light adaptation system is based on the concept that the information of illumination variation due to dynamic light environment can be enquired from sequential images captured in real-time. Therefore, two criteria of light adaptation system for 3D model-based recognition against illumination variation are as follow;

2.7 Detection of 3D marker in hue value

Due to less sensitive to environment, hue space is used to detect 3D marker. Then, due to the distance in degree in hue space, three basic colors (blue, red and green) are selected for 3D marker.

2.8 Active hue range

In stead of using fixed hue range to detect 3D marker in every images, hue range for next images are updated from the distribution of histogram of color objects in hue space from previous image.

The proposed lighting adaption algorithm is as follow:

1. Initiate recognition process using defined standard hue values for each basic color.
2. Select the sampling points in previous recognized object area through projection from estimated pose.

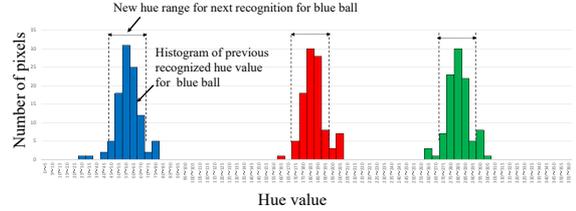


Fig. 7: Updating new hue ranges based on distribution of previous recognized object histogram.

3. Get the hue value corresponding to each point on the image.
4. And automatically adjust the range of hue values to be used for follow-up recognition according to the distribution of the hue.

3 Experimental Results and Discussion

3.1 Experimental Environment

Experiments were conducted in indoor pool (3 m in length, 2 m in width, 0.75 m in depth). To simulate dynamic lighting environment in term of both illumination intensity and direction variation, LED light source installed on ROV was configured to provide different illumination intensity and direction.

3.2 Docking Performance using Proposed System

Finally, we conducted experiments to confirm whether the proposed system using light adaptation system can operate docking task under unknown environment. In order to perform docking experiments, a rod on the right side of the underwater robot and cylinder hole on the left side of the target are designed as shown in Fig.10. When the robot is in the right relative pose to the object, then it has to move ahead to insert the rod into the cylinder hole. The desired pose before and after docking operation is assigned as below. The values in bracket are the desired pose when the docking operation is completed. Fig.10 shows docking experimental layout with coordinates of vehicle and 3D marker.

$$\begin{aligned} x_d &= {}^H z_M = 600 \ (350)[mm], \\ y_d &= {}^H x_M = 0 \ (0)[mm], \\ z_d &= {}^H y_M = -67 \ (-67)[mm], \quad \epsilon_{2d} = 0 \ (0)[deg] \end{aligned}$$

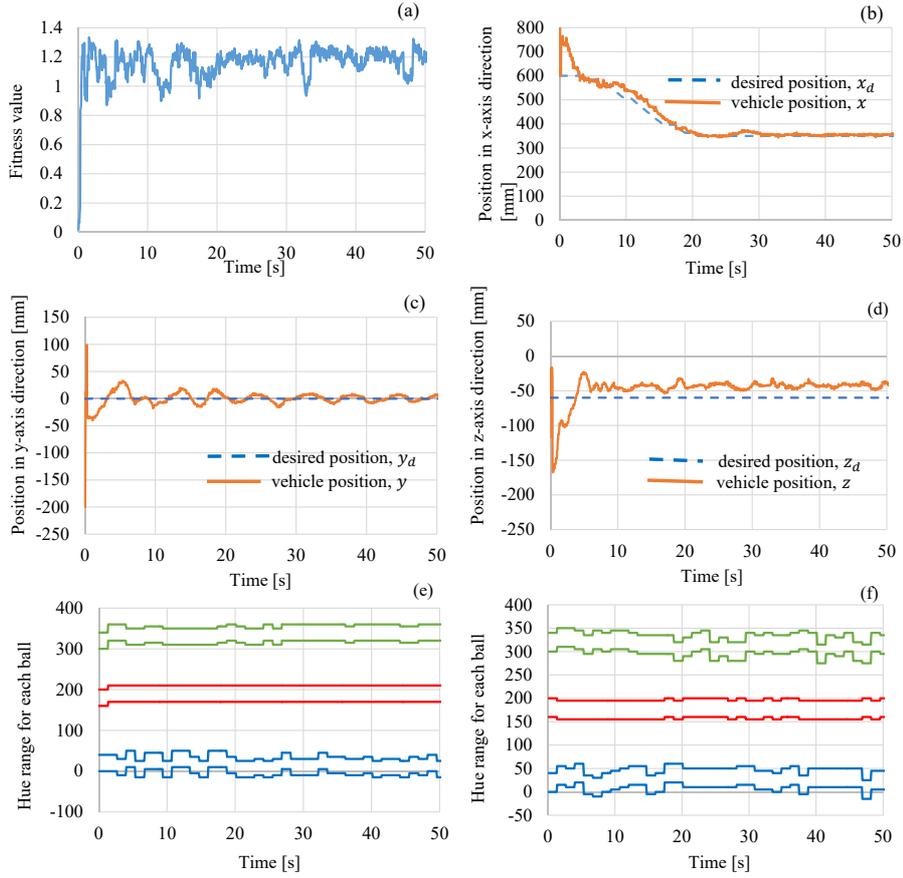


Fig. 8: Docking Performance with Lighting Adaptation System: (a) fitness value, (b) position in x-axis direction, (c) position in y-axis direction, (d) position in z-axis direction (e) hue range to detect 3D marker in left image, and (f) hue range to detect 3D marker in right image.

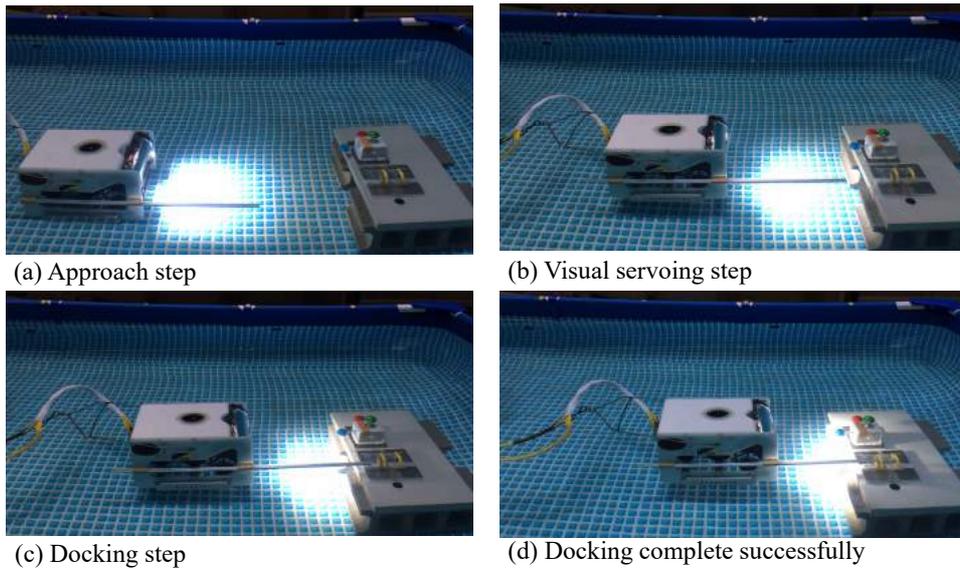


Fig. 9: Docking Process: (a) Approach step, (b) Visual servoing step, (c) Docking step, (d) Docking completed successfully.

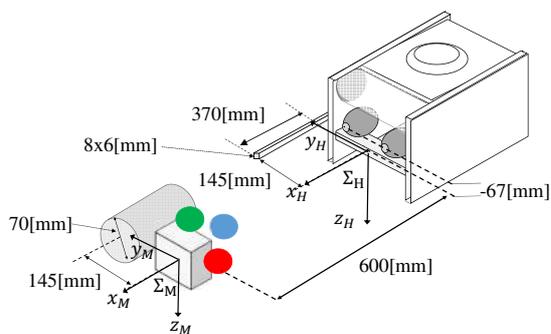


Fig. 10: Docking experimental layout.

Fig.8(a) shows the fitness value of recognition during docking operation under unknown light environment. As shown in Fig.8(c), visual servoing step was transitioned to docking step after 10 seconds when the vehicle is stable with allowance position errors ± 20 mm for 165 ms. Fig.8(b), (c), (d) show the real-time position of vehicle following desired pose. Fig.8(e), (f) shows the active hue range updated in real-time for recognition in left and right images. Fig.9 shows the docking process step by step. Therefore, we concluded that docking experiment under unknown lighting environment is completed successfully by only mean of virtual servoing using adaptive system following designed docking strategy within 50 seconds.

4 Conclusion

In this work, vision-based docking system for underwater vehicle was implemented. A unidirectional docking station with 3D marker was simulated in indoor pool. A real-time pose tracking using 3D model-based recognition and real-time Multi-step GA was proven for high homing accuracy. In addition, to overcome illumination variation problem due to dynamic light environment, light adaptation system was designed and implemented. Finally, docking experiment was conducted successfully using proposed system under unknown light environment. Follow-up docking experiments in an actual AUV in sea trials will be conducted in future.

Reference

- 1) Steve Cowen, Susan Briest and James Dombrowski, *Underwater Docking of Autonomous Undersea Vehicle using Optical Terminal Guidance*, Proc. IEEE Oceans Engineering, Vol.2, pp.1143-1147, 1997.
- 2) Michael D. Feezor, F. Yates Sorrell, Paul R. Blankinship and James G. Bellingham, *Autonomous Underwater Vehicle Homing/Docking via Electromagnetic Guidance*, IEEE Journal of Oceans Engineering, Vol. 26, NO. 4, pp.515-521, October 2001.
- 3) Robert S. McEwen, Brett W. Hobson, Lance McBride and James G. Bellingham, *Docking Control System for a 54-cm-Diameter (21-in)*

AUV, IEEE Journal of Oceanic Engineering, Vol. 33, NO. 4, pp. 550-562, October 2008 .

- 4) Ken Teo, Benjamin Goh and Oh Kwee Chai, *Fuzzy Docking Guidance Using Augmented Navigation System on an AUV*, IEEE Journal of Oceans Engineering, Vol. 37, NO. 2, April 2015.
- 5) Ken Teo, E. An and P.-P. J. Beaujean, *A robust fuzzy autonomous underwater vehicle (AUV) docking approach for unknown current disturbances*, IEEE Journal of Oceanic Engineering, Vol. 37, No. 2, pp. 143-155, April 2012.
- 6) Amaury N'egre, Cedric Pradalier and Matthew Dunbabin, *Robust vision-based underwater homing using self similar landmarks*, Journal of Field Robotics, Wiley-Blackwell, Special Issue on Field and Service Robotics, 25 (6-7), pp.360-377, 2008.
- 7) Foresti G.L. , Gentili S. and Zampato M., *A vision-based system for autonomous underwater vehicle navigation*, OCEANS '98 Conference Proceedings (Volume:1), pp 195-199, 1998.
- 8) Krupinski S. , Allibert G. and Hamel T., *Pipeline tracking for fully-actuated autonomous underwater vehicle using visual servo control*, American Control Conference (ACC), pp 6196-6202, 2012.
- 9) Jin-Yeong Park, Bong-Huan Jun, Pan-Mook Lee, Fill-Youb Lee and Jun-ho Oh, *Experiment on Underwater Docking of an Autonomous Underwater Vehicle ISimI using Optical Terminal Guidance*, OCEANS 2007, Europe, pp 1-6, 2007.
- 10) J.-Y. Park, B.-H. Jun, P.-M. Lee and J. Oh, *Experiments on vision guided docking of an autonomous underwater vehicle using one camera*, Ocean Eng., Vol. 36, No. 1, pp. 48-61, Jan. 2009.
- 11) Myo Myint, Kenta Yonemori, Akira Yanou, Mamoru Minami and Shintaro Ishiyama, *Visual-servo-based Autonomous Docking System for Underwater Vehicle Using Dual-eyes Camera 3D-Pose Tracking*, Proceedings of the 2015 IEEE/SICE International Symposium on System Integration, Nagoya, Japan, pp.989-994, 2015.
- 12) Myo Myint, Kenta YONEMORI, Akira YANO, Shintaro ISHIYAMA and Mamoru MINAMI, *Robustness of Visual-Servo against Air Bubble Disturbance of Underwater Vehicle System Using Three-Dimensional Marker and Dual-Eye Cameras*, Proceedings of the International Conference OCEANS15 MTS/IEEE, Washington DC, USA, pp.1-8, 2015.

- 13) Suzuki. H and Minami. M, *Visual Servoing to Catch Fish Using Global/Local GA Search*, IEEE/ASME Transactions on Mechatronics, Vol.10, Issue 3, pp 352-357, 2005.
- 14) Yu F., Minami M., Song W., Zhu J. and Yanou A., *On-line head pose estimation with binocular hand-eye robot based on evolutionary model-based matching*, Journal of Computer and Information Technology, Vol.2, No.1, pp.43-54, 2012.
- 15) Song W. and Minami M., *3-D Visual Servoing Using Feedforward Evolutionary Recognition*, Journal of the Robot Society of Japan, Vol.28, No.5, pp.591-598 (in Japanese), 2010.
- 16) Wei. Song, M. Minami, Fujia Yu, Yanan Zhang and Akira Yanou, *3-D Hand and Eye-Vergence Approaching Visual Servoing with Lyapunov-Stable Pose Tracking*, IEEE Int. Conf. on Robotics and Automation (ICRA), pp. 5210-5217, 2011.
- 17) W. Song, M. Minami and S. Aoyagi, *On-line Stable Evolutionary Recognition Based on Unit Quaternion Representation by Motion-Feedforward Compensation*, International Journal of Intelligent Computing in Medical Sciences and Image Processing (IC-MED) Vol. 2, No. 2, pp.127-139, 2007.
- 18) Yu Cui, Kenta Nishimura, Yusuke Sunami, Mamoru Minami, Takayuki Matsuno and Akira Yanou, *Analyses about Trackability of Hand-eye-vergence Visual Servoing in Lateral Direction*, OPTIROB Conference, Romania, 2015.
- 19) Ura, T., Kurimoto, Y., Kondo, H., Nose, Y., Sakamaki, T. and Kuroda, Y., *Observation behavior of an AUV for ship wreck investigation*, Proceedings of the OCEANS 2005 MTS/IEEE Conference, Vol.3, pp.2686-2691, 2005.

Hand/Eye-Vergence システムに基いて奥行き方向に移動する物体へのビジュアルサーボ

○寇 ギョウ郡 田 宏志 見浪 護 (岡山大学)

Visual Servoing to Longitudinally Moving Object Based on Hand/Eye-Vergence Dual Cameras System

*Y. Kou H. Tian M. Minami (Okayama University)

Abstract— Visual servoing to moving target with hand-eye cameras fixed at hand is inevitably affected by robot's dynamical oscillations, therefore it is difficult for the fixed-hand-eye robot to keep target object at the center of cameras' view, since nonlinear dynamical effects of whole manipulator and intensive dynamical coupling of each link stand against keeping consistent servoing accuracy. To improve the defects of the fixed-hand-eye system, hand-eye-vergence system has attracted attention—left and right cameras' directions could be rotated to observe and keep the target object be recognized at the center of camera images, reducing the influences of aberration of camera lens. On top of this, the longitudinal moving object is more difficult to be recognized than the lateral one, because the image change is less than the real motion of the object. By using “3D Move on Sensing (3D-MoS)”, which is a method to control robot's 3D pose (position and orientation) by using detected 3D Pose through dual cameras system. This research confirmed that the hand-eye-vergence system can improve the observability and trackability on visual servoing in camera-depth direction.

Key Words: Visual Servoing, Eye-vergence, 3D-MoS

1 Introduction

Visual servoing is a control method to control the motion of robot. By incorporating visual information obtained from visual sensor[1]-[4] with the feedback loop, visual servoing is expected to be able to allow the robot adapt the changing or unknown environment. Some methods have been proposed already to improve the observation abilities of the robot, for instance by using stereo cameras[5], multiple cameras[6], and a method with one camera fixed on the end-effector, the other done in the workspace[7]. However these methods obtain different views to observe the object by increasing the number of cameras, leaving the system less adaptive for changing environment.

Even through there have been plenty try concerning on the visual servoing about tracking object, however the final goal of the visual servoing was been considered as realize the end-effector approaching to the target then work on it, for instance grasping. In this case, the desired relation between the cameras and the object should be time varying, for this reason, the eye-vergence camera system is a settlement to keep suitable viewpoint on the target all the time during the approaching visual servoing, utilizing the changeable cameras' eye direction in order to keep the target been recognized at the center of the image.

The other merit of eye-vergence is concerning dynamical effects to keep tracking a moving target in the camera's view. For example, when people keep tracking a moving object, they may catch up to the object in case of the object moving slowly, but when the object become to move faster and faster, human's face cannot be kept positioned squarely to the object, while human's eye can still keep staring at the ob-

ject because of its small mass and inertial moment. Needless to say in visual servoing application, keeping closed loop of visual feedback is vital from a view point of closed loop control stability.

By a previous work, it has been clarified that the eye-vergence system has superior stability and trackability performances in pose tracking dynamical motions in lateral direction. However, pose tracking of longitudinally moving object has a difficulty for depth distance to be estimated than laterally moving one, because the image changes becomes less in cameras' view against when the object's motion in real world. In this report, we conduct some visual servoing experiments about object's longitudinal movement by using fixed-camera system and confirmed that eye-vergence system can perform well in longitudinal tracking. From the experiment results, we verified about the error of object estimation by showing the action of GA in time-domain during visual servoing.

2 3D Pose Tracking Method

In this paper, we take a rectangular solid block as an example of the target to explain The 3D Pose Tracking Method. The shape and color of the solid block is assumed to be known. Other different kinds of targets can also be measured by model-based matching strategy if their character is given.

2.1 Kinematics of Stereo-Vision

We utilize perspective projection as projection transformation. Fig. 1 shows the coordinate system of the dual-eyes vision system. The target object's coordinate system is represented by Σ_M and image coordinate systems of the left and right cameras are represented by Σ_{IL} and Σ_{IR} . A point i on the target

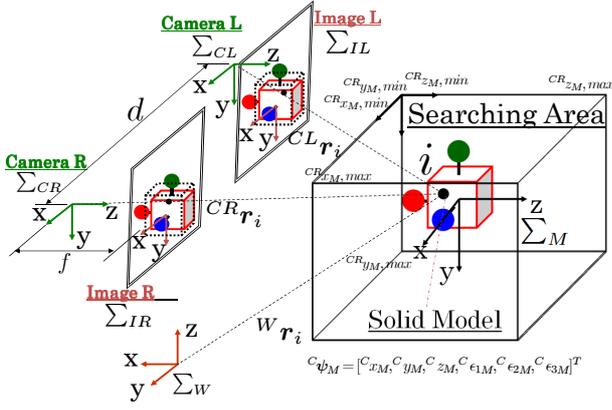


Fig. 1: Coordinate systems of dual eyes

can be described using these coordinates and homogeneous transformation matrices. At first, a homogeneous transformation matrix from right camera coordinates, Σ_{CR} to Σ_M is defined as ${}^{CR}\mathbf{T}_M$. And an arbitrary point i on the target object in Σ_{CR} and Σ_M is defined ${}^{CR}\mathbf{r}_i$ and ${}^M\mathbf{r}_i$. Then ${}^{CR}\mathbf{r}_i$ is,

$${}^{CR}\mathbf{r}_i = {}^{CR}\mathbf{T}_M {}^M\mathbf{r}_i. \quad (1)$$

Where ${}^M\mathbf{r}_i$ is predetermined fixed vectors. Using a homogeneous Σ_W to Σ_{CR} , i.e., ${}^W\mathbf{T}_{CR}$, then ${}^W\mathbf{r}_i$ is got as,

$${}^W\mathbf{r}_i = {}^W\mathbf{T}_{CR} {}^{CR}\mathbf{r}_i. \quad (2)$$

The position vector of i point in right image coordinates, ${}^{IR}\mathbf{r}_i$ is described by using projection matrix \mathbf{P} of camera as,

$${}^{IR}\mathbf{r}_i = \mathbf{P} {}^{CR}\mathbf{r}_i. \quad (3)$$

By the same way as above.

$${}^{CL}\mathbf{r}_i = {}^{CL}\mathbf{T}_M {}^M\mathbf{r}_i. \quad (4)$$

$${}^W\mathbf{r}_i = {}^W\mathbf{T}_{CL} {}^{CL}\mathbf{r}_i. \quad (5)$$

$${}^{IL}\mathbf{r}_i = \mathbf{P} {}^{CL}\mathbf{r}_i. \quad (6)$$

Then position vectors projected in the Σ_{IR} and Σ_{IL} of arbitrary point i on target object can be described ${}^{IR}\mathbf{r}_i$ and ${}^{IL}\mathbf{r}_i$. Here, position and orientation of Σ_M based on Σ_{CR} has been defined as ${}^{CR}\psi_M$. Then Eq.(3), Eq.(6) are rewritten as,

$$\begin{cases} {}^{IR}\mathbf{r}_i = \mathbf{f}_R({}^{CR}\psi_M, {}^M\mathbf{r}_i) \\ {}^{IL}\mathbf{r}_i = \mathbf{f}_L({}^{CL}\psi_M, {}^M\mathbf{r}_i). \end{cases} \quad (7)$$

This relation connects the arbitrary points on the object and projected points on the left and right images corresponding to a 3D pose ${}^{CR}\psi_M$ of the object. The measurement of ${}^{CR}\psi_M(t)$ in real time will be solved by consistent convergence of a matching model to the target object by a “Real-Time Multi-Step GA”.

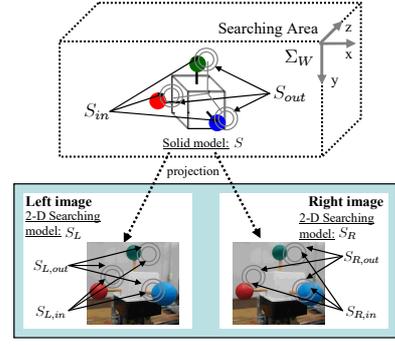


Fig. 2: Definition of a solid model and left/right searching models

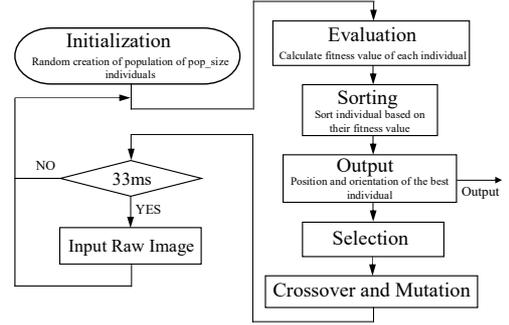


Fig. 3: Flow chart of Real-Time Multi-Step GA recognition

2.2 Model-based matching

The 3D solid model is shown in Fig. 2. The model is constituted of inside space S_{in} and outside space S_{out} . The left and right 2D searching models, named S_L and S_R , are shown in Fig. 2(on the bottom).

Supposing there are distributed solid models in the searching space in Σ_W , each has its own pose ${}^{CR}\psi_M$, ${}^{CL}\psi_M$. To determine which solid model is most close to the real target, a correlation function used fitness function in GA is defined for evaluation. Here, we use color information to search for the target object in the images. In order to evaluate difference of hue value between the object and the searching model. The hue value of right image at the position ${}^{IR}\mathbf{r}_i$ is expressed as $p({}^{IR}\mathbf{r}_i)$, and the hue value of left image at the position ${}^{IL}\mathbf{r}_i$ is expressed as $p({}^{IL}\mathbf{r}_i)$.

$$\begin{aligned} F({}^C\psi_M) &= \left\{ \left(\sum_{{}^{IR}\mathbf{r}_i \in S_{R,in}({}^{CR}\psi_M)} p({}^{IR}\mathbf{r}_i) - \sum_{{}^{IR}\mathbf{r}_i \in S_{R,out}({}^{CR}\psi_M)} p({}^{IR}\mathbf{r}_i) \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(\sum_{{}^{IL}\mathbf{r}_i \in S_{L,in}({}^{CL}\psi_M)} p({}^{IL}\mathbf{r}_i) - \sum_{{}^{IL}\mathbf{r}_i \in S_{L,out}({}^{CL}\psi_M)} p({}^{IL}\mathbf{r}_i) \right) \right\} / 2 \\ &= \{F_R({}^{CR}\psi_M) + F_L({}^{CL}\psi_M)\} / 2 \end{aligned} \quad (8)$$

Eq.(8) shows the fitness function that calculate the correlation function between the search model and image. When the searching model fits to the target object being imaged in the right and left images, then the fitness function $F({}^C\psi_M)$ gives maximum value,

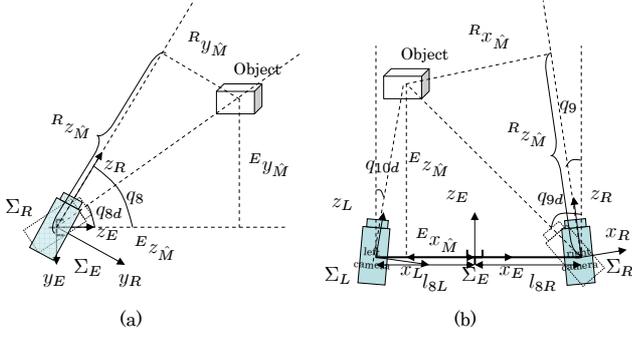


Fig. 4: Calculation of tilt and pan angles

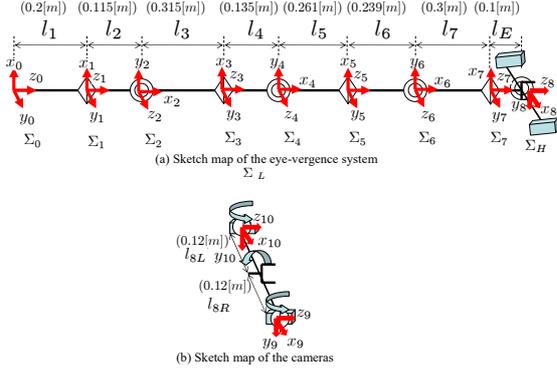


Fig. 5: Frame structure of manipulator

i.e., $F = 1$.

Therefore the problem of finding a target object and detecting its position/orientation can be converted to searching ${}^C\psi_M$ that maximizes $F({}^C\psi_M)$. We solve this optimization problem by GA. The genes of GA representing possible pose solution ${}^C\psi_M$ is defined as,

$$\underbrace{01 \cdots 01}_{12\text{bit}} \underbrace{00 \cdots 01}_{12\text{bit}} \underbrace{11 \cdots 01}_{12\text{bit}} \underbrace{01 \cdots 01}_{12\text{bit}} \underbrace{01 \cdots 11}_{12\text{bit}} \underbrace{01 \cdots 10}_{12\text{bit}}.$$

The 72 bits of gene refers to the range of the searching area: $-150 \leq t_x \leq 150[\text{mm}]$, $0 \leq t_y \leq 300[\text{mm}]$, $650 \leq t_z \leq 950[\text{mm}]$, and $-0.3 \leq \epsilon_1, \epsilon_2, \epsilon_3 \leq 0.3$, where ϵ_i is defined as quaternion and represents almost the same range of $-54 \leq \text{roll, pitch, yaw} \leq 54[\text{deg}]$.

Although GA has been applied to a number of robot control systems [13], it has not been yet applied to a robot manipulator control system to track a target in 3D space with unpredictable movement in real time, since the general GA method costs much time until its convergence. So here, for real-time visual control purposes, we have employed GA in a way that we denoted as ‘‘Real-Time Multi-Step GA’’ evolution. This means that the GA evolutionary iteration is applied one time to the newly input image. While using the elitist model of the GA, the most accurate pose of a target can be detect in every new image by the pose of the gene with highest fitness value. In addition, this feature happens to be favorable for real-time visual recognition. The flow chart of the Real-Time Multi-

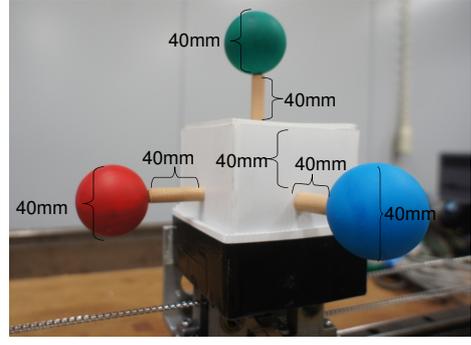


Fig. 6: 3D marker

step GA process is shown in Fig. 3. The pose of the best gene is output in every newly input image on a on-line measurement result, to be used as command value to the manipulator’s controller. Thereby real-time visual servoing can be performed. Our previous research has confirmed the 2D recognition method enabled a eye-in-hand robot manipulator to catch a swimming fish by a net equipped at the hand [11]. Fig. 3 shows that the image inputting process is included in the GA iteration process seeking for the potential solution, i.e., toward the target. That is, the evolving speed to the solution in the image should be faster than the speed of the target object in the successively input images, for the success of real-time recognition by ‘‘Real-Time Multi-Step GA.’’

3 Hand & Eye Visual Servoing Controller

3.1 Hand Visual Servoing Controller

The block diagram of our proposed hand & eye-vergence visual servoing controller is shown in Fig. 8. The hand-visual servoing is the outer loop. Based on the above analysis of the desired-trajectory generation, the desired hand velocity ${}^W\dot{\mathbf{r}}_d$ is calculated as,

$${}^W\dot{\mathbf{r}}_d = \mathbf{K}_{P_p} {}^W\mathbf{r}_{E,Ed} + \mathbf{K}_{V_p} {}^W\dot{\mathbf{r}}_{E,Ed}, \quad (9)$$

where ${}^W\mathbf{r}_{E,Ed}$, ${}^W\dot{\mathbf{r}}_{E,Ed}$ can be calculated from ${}^E\mathbf{T}_{Ed}$ and ${}^E\dot{\mathbf{T}}_{Ed}$. \mathbf{K}_{P_p} and \mathbf{K}_{V_p} are positive definite matrix to determine PD gain.

The desired hand angular velocity ${}^W\boldsymbol{\omega}_d$ is calculated as,

$${}^W\boldsymbol{\omega}_d = \mathbf{K}_{P_o} {}^W\mathbf{R}_E^E \Delta\boldsymbol{\epsilon} + \mathbf{K}_{V_o} {}^W\boldsymbol{\omega}_{E,Ed}, \quad (10)$$

where ${}^E\Delta\boldsymbol{\epsilon}$ is a quaternion error [12] calculated from the pose tracking result, and ${}^W\boldsymbol{\omega}_{E,Ed}$ can be computed by transforming the base coordinates of ${}^E\mathbf{T}_{Ed}$ and ${}^E\dot{\mathbf{T}}_{Ed}$ from Σ_E to Σ_W . Also, \mathbf{K}_{P_o} and \mathbf{K}_{V_o} are suitable feedback matrix gains. We define the desired hand pose as ${}^W\boldsymbol{\psi}_d^T = [{}^W\mathbf{r}_d^T, {}^W\boldsymbol{\epsilon}_d^T]^T$

The desired joint variable $\mathbf{q}_{Ed} = [q_{1d}, \dots, q_{7d}]^T$ and $\dot{\mathbf{q}}_{Ed}$ is obtained by

$$\mathbf{q}_{Ed} = \mathbf{f}^{-1}({}^W\boldsymbol{\psi}_d^T) \quad (11)$$

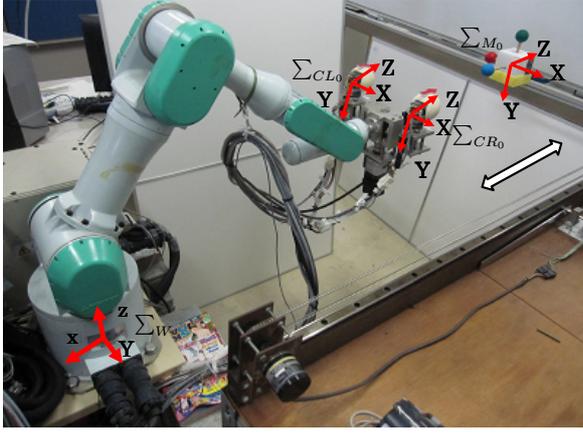


Fig. 7: Object and the visual-servoing system

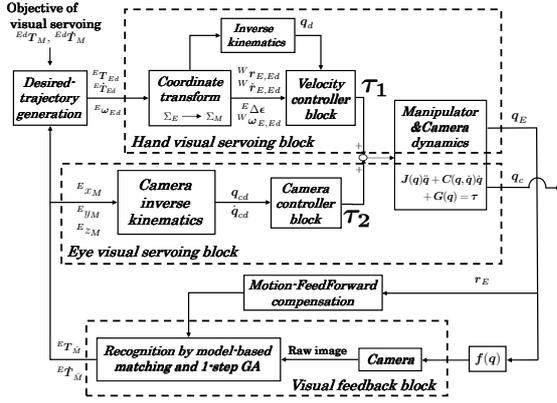


Fig. 8: Block diagram of the hand visual servoing system

$$\dot{q}_{Ed} = \mathbf{J}_E^+(\mathbf{q}) \begin{bmatrix} W \dot{\mathbf{r}}_d \\ W \boldsymbol{\omega}_d \end{bmatrix} \quad (12)$$

where $\mathbf{f}^{-1}(W\boldsymbol{\psi}_d^T)$ is the inverse kinematic function and $\mathbf{J}_E^+(\mathbf{q})$ is the pseudo-inverse matrix of $\mathbf{J}_E(\mathbf{q})$, and $\mathbf{J}_E^+(\mathbf{q}) = \mathbf{J}_E^T(\mathbf{J}_E\mathbf{J}_E^T)^{-1}$. In this report, we made q_1 is 0, and used the inverse kinematics to calculate all joint angles. It can solve the redundancy problem. Meanwhile we took a controller to make the joint of angles approximately as the desired joint angles. So we defined the formula of the desired joint angles in the new controller as

$$\dot{q}_{Ed} = \mathbf{k}_p(\mathbf{q}_{Ed} - \mathbf{q}_E) + \mathbf{J}_E^+(\mathbf{q}) \begin{bmatrix} W \dot{\mathbf{r}}_d \\ W \boldsymbol{\omega}_d \end{bmatrix} \quad (13)$$

where \mathbf{k}_p is P positive gain.

The hardware control system of the velocity-based servo system of PA10 is expressed as

$$\boldsymbol{\tau} = \mathbf{K}_{SP}(\mathbf{q}_d - \mathbf{q}) + \mathbf{K}_{SD}(\dot{\mathbf{q}}_d - \dot{\mathbf{q}}) \quad (14)$$

where \mathbf{K}_{SP} and \mathbf{K}_{SD} are symmetric positive definite matrices to determine PD gain.

3.2 Eye-vergence Visual Servoing Controller

The eye-vergence visual servoing is the inner loop of the visual servoing system shown in Fig. 8. In this

paper, we use two pan-tilt cameras for eye-vergence visual servoing. Here, the positions of cameras are supposed to be fixed on the end-effector. For camera system, q_8 is tilt angle, q_9 and q_{10} are pan angles, and q_8 is common for both cameras.

As it is shown in Fig. 4 (a) and (b), ${}^E x_{\hat{M}}$, ${}^E y_{\hat{M}}$, ${}^E z_{\hat{M}}$ express position of the detected object in the end-effector coordinate. The desired angle of the camera joints are calculated by:

$$q_{8d} = \text{atan2}({}^E y_{\hat{M}}, {}^E z_{\hat{M}}) \quad (15)$$

$$q_{9d} = \text{atan2}(-l_{8R} + {}^E x_{\hat{M}}, {}^E z_{\hat{M}}) \quad (16)$$

$$q_{10d} = \text{atan2}(l_{8L} + {}^E x_{\hat{M}}, {}^E z_{\hat{M}}) \quad (17)$$

where $l_{8L} = l_{8R} = 120[\text{mm}]$ that is the camera location.

The controller of eye-visual servoing is given by

$$\dot{q}_{8Cd} = K_P(q_{8d} - q_8) \quad (18)$$

$$\dot{q}_{9Cd} = K_P(q_{9d} - q_9) \quad (19)$$

$$\dot{q}_{10Cd} = K_P(q_{10d} - q_{10}) \quad (20)$$

where K_P are positive control gain.

Because the motion of camera motor is an open loop, we can only make it rotate a certain degree without getting the actual angle during the rotation, which make us cannot get the accurate camera angle. So the desired camera angles are input in every 33ms, and the input is limited to a certain value.

4 Experiment Of Hand Eye-Vergence Visual Servoing

4.1 Experimental system

To verify the effectiveness of the hand & eye visual servoing system through real robot, we used a robot, PA-10 robot arm that has a 7-DoF robot arm manufactured by Mitsubishi Heavy Industries. Two rotatable cameras mounted on the end-effector are FCB-1X11A manufactured by Sony Industries. The frame frequency of stereo cameras is set as 30fps. The image processing board, CT-3001, receiving the image from the CCD camera is connected to the DELL WORKSTATION PWS650 (CPU: Xeon, 2.00 GHz) host computer. The structure of the manipulator and the cameras are shown in Fig. 5 (a) and (b).

The 3D marker as used for the target object in the experiment composes a red ball, a green ball and a blue ball, whose dimension is shown in Fig. 6. The coordinate of the target object and the manipulator in experiment are shown in Fig. 7, the white arrow under the object express the move direction of it.

We did several contrast experiments using fixed camera system, by comparing the data from fixed camera system with the eye-vergence system, to check the track ability of the eye-vergence system. First, we did an experiment in which true object's x , y , z , ε_1 , ε_2 , ε_3 , are assumed to be given to servoing controller. Then we did 3 groups of experiments of frequency

response. In these experiments, we made 3-DoF position are recognized by the cameras respectively. For every group, we set $\omega=1.256$ rad/s, $\omega=0.638$ rad/s, and $\omega=0.314$ rad/s separately, which are angular velocities of the object.

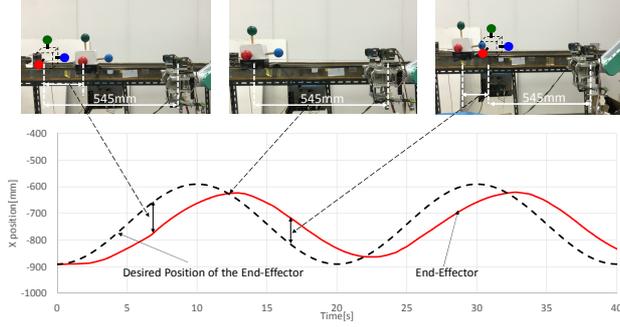


Fig. 9: The relationship of the position of a target and a hand



Fig. 10: $\omega = 1.256$ (T=5s), Eye-Vergence system

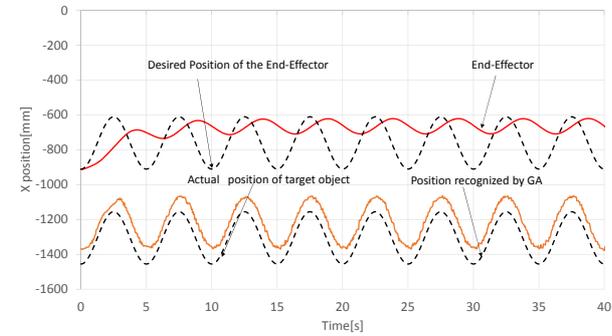


Fig. 11: $\omega = 1.256$ (T=5s), Fixed-Camera system

4.2 Experiment condition

The initial hand pose is defined as Σ_{E_0} , and the initial object pose is defined as Σ_{M_0} . The homogeneous transformation matrix from Σ_W to Σ_{E_0} and from Σ_W to Σ_{M_0} are:

$${}^W T_{E_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & -890[mm] \\ 1 & 0 & 0 & 0[mm] \\ 0 & -1 & 0 & 440[mm] \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (21)$$

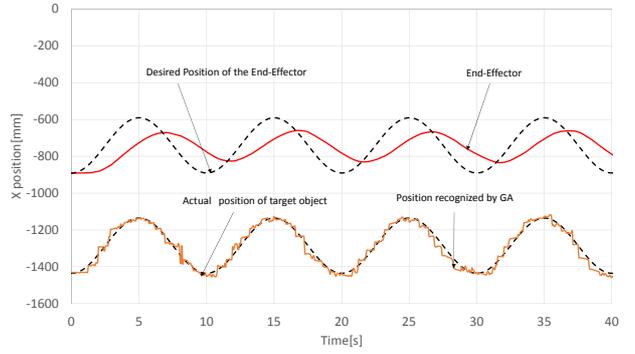


Fig. 12: $\omega = 0.628$ (T=10s), Eye-Vergence system

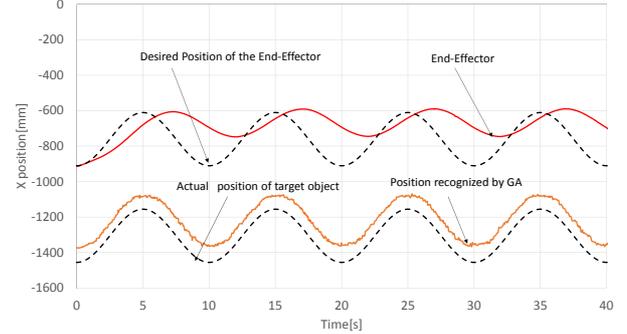


Fig. 13: $\omega = 0.628$ (T=10s), Fixed-Camera system

$${}^W T_{M_0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -1 & -1435[mm] \\ 1 & 0 & 0 & 0[mm] \\ 0 & -1 & 0 & 440[mm] \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (22)$$

The target object move according to the following time function

$${}^{M_0} z_M(t) = 150 - 150 \cos(\omega t)[mm] \quad (23)$$

The relation between the object and the desired end-effector is set as:

$${}^{E_d} \psi_M = [0, -100[mm], 545[mm], 0, 0, 0] \quad (24)$$

4.3 Experiment Results

In this experiment conditions, we have carried out some longitudinal frequency response experiments to moving object and the Fig.9 shows the relationship of the position of a target and a hand. We made x-position, 3-Dof position, and 6-Dof position and orientation are estimated by GA respectively, and take the results of 3-Dof position. From each of the results we can see that the eye-vergence system has smaller delay phase which means it will observe the object better. I show the relationship between the GA genes and the object position by the results of the obtained GA. In the Fig.10 and Fig.11, the GA from Eye-Vergence system can estimate target object and track, but the GA from Fixed-Camera is always carrying a delay for about 80[mm], however, even the GA can estimate

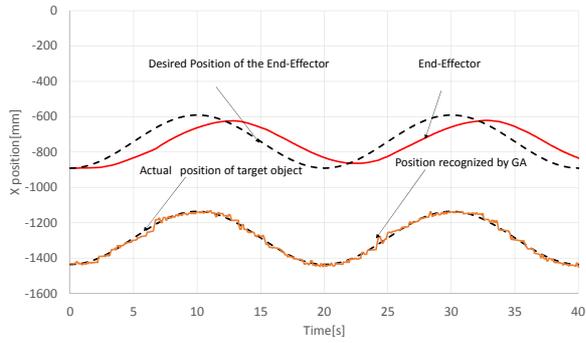


Fig. 14: $\omega = 0.314$ ($T=20s$), Eye-Vergence system



Fig. 15: $\omega = 0.314$ ($T=20s$), Fixed-Camera system

the correct position of the target, but the PA-10 can not track the target object. Because the moment of the inertia of camera is smaller than PA-10's, which is a characteristic of eye-vergence system. Also from the Fig.10 and Fig.11, we can easily find even both two systems' behaviour is poor, the track ability of eye-vergence system is still better than fixed-camera system.

From Fig.12, Fig.13, Fig.14, Fig.15, Fig.16, and Fig.17, we can see with the target object motion is getting slower, the manipulator can track the target with smaller delay. For the GA genes results, the eye-vergence can estimate the target with very small delay, on the contrary, there are always be about 80[mm] error of the fixed-camera system, from which we can conclude that eye-vergence system has a superior performance than fixed-camera system.

5 Conclusion

In this paper, we have carried out some longitudinal frequency response experiments to evaluate the observation and tracking ability on a moving object of visual servoing system. From the experiment results, we can draw a conclusion that the object moving in camera-depth direction can be recognised and Real-Time Multi-step GA can track the correct position in real-time, meaning the Real-Time Multi-step GA is a superior settlement to realize the tracking in real-time. And the authors grasp the real-time estimate tracking error by revealing the relationship between the GA and the target object that was searched in fixed-camera system, by comparing the results, the

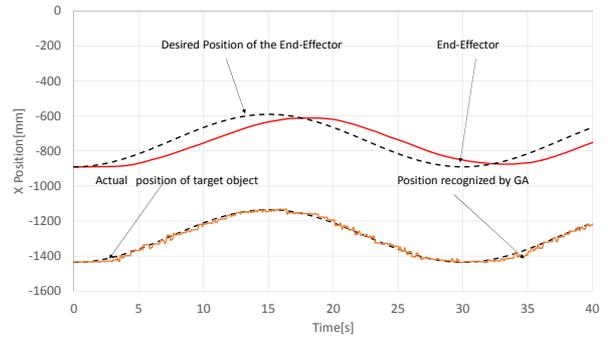


Fig. 16: $\omega = 0.209$ ($T=30s$), Eye-Vergence system

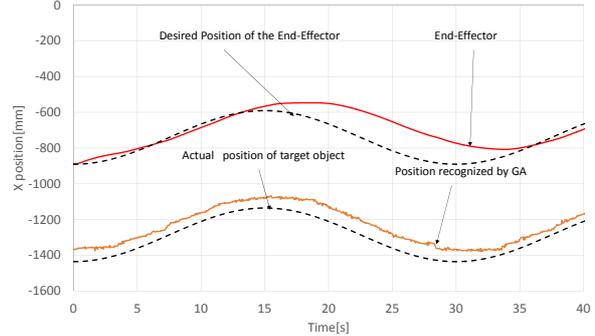


Fig. 17: $\omega = 0.209$ ($T=30s$), Fixed-Camera system

authors concluded that hand-eye-vergence system has a superior performance than fixed-camera system.

References

- 1) S.Hutchinson, G.Hager, and P.Corke, "A Tutorial on Visual Servo Control", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 12, no. 5, pp. 651-670, 1996.
- 2) P.Y.Oh, and P.K.Allen, "Visual Servoing by Partitioning Degrees of Freedom", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 17, no. 1, pp. 1-17, 2001.
- 3) E.Malis, F.Chaumette and S.Boudet, "2-1/2-D Visual Servoing", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 15, no. 2, pp. 238-250, 1999.
- 4) P.K.Allen, A.Timchenko, B.Yoshimi, and P.Michelman, "Automated Tracking and Grasping of a Moving object with a Robotic Hand-Eye System", IEEE Trans. on Robotics and Automation, vol. 9, no. 2, pp. 152-165, 1993.
- 5) Wolfgang Sepp, Stefan Fuchs and Gerd Hirzinger, "Hierarchical Featureless Tracking for Position-Based 6-DoF Visual Servoing", Proceedings of the 2006 IEEE/RSJ Int. Conf. on Intelligent Robotics and Systems (IROS), pp.4310-4315, 2006.
- 6) Toshifumi Hiramatsu, Takanori Fukao, Keita Kurashiki, Koichi Osuka "Image-based Path Following Control of Mobile Robots with Central Catadioptric Cameras" IEEE International Conference on Robotics and Automation Kobe, Japan, May 12-17, 2009
- 7) Omar Tahri, Youcef Mezouar "Generic Decoupled Image-Based Visual Servoing for Cameras Obeying the Unified Projection Model" IEEE International Conference on Robotics and Automation Kobe, Japan, May 12-17, 2009
- 8) W. Song, M. Minami, Y. Mae and S. Aoyagi, "Online Evolutionary Head Pose Measurement by Feedforward Stereo Model Matching", IEEE Int. Conf. on Robotics and Automation (ICRA), pp.4394-4400, 2007.

- 9) Omar Tahri and Francois Chaumette, "Point-Based and Region-Based Image Moments for Visual Servoing of Planar Objects", IEEE Tran. on Robotics, vol. 21, no. 6, Dec 2005.
- 10) Tarek Hamel and Robert Mahony, "Visual Servoing of an Under-Actuated Dynamic Rigid-Body System: An Image-Based Approach", IEEE Trans. on Robotics and Automation, VOL. 18, NO. 2, APRIL 2002.
- 11) M.Minami, H.Suzuki, J.Agbanhan, T.Asakura:"Visual Servoing to Fish and Catching Using Global/Local GA Search", 2001 IEEE/ASME Int. Conf. on Advanced Intelligent Mechatronics Proc., pp.183-188, 2001.
- 12) W. Song, M. Minami, S. Aoyagi, "On-line Stable Evolutionary Recognition Based on Unit Quaternion Representation by Motion-Feedforward Compensation", International Journal of Intelligent Computing in Medical Sciences and Image Processing (IC-MED) Vol. 2, No. 2, Page 127-139 (2007).
- 13) T.Nagata, K.Konishi and H.Zha: "Cooperative manipulations based on Genetic Algorithms using contact information", Proceedings of the International Conference on Intelligent Robots and Systems, pp.400-5, 1995

3次元距離カメラを用いた未知物体把持のためのロボット知覚

○増田 寛之, 本吉 達郎, 小柳 健一, 大島 徹 (富山県立大学),

Robot Perception for Unknown Object Grasping using 3D Depth Sensor

○H. Masuta, T. Motoyoshi, K. Koyanagi, T. Oshima (Toyama Prefectural University)

Abstract: This paper describes an unknown object detection for grasping by a robot arm. Conventional unknown object extraction methods have need predefined knowledge, and have limitations with high computational costs and low-accuracy for small objects. We propose an unknown object detection method based on 3D plane detection. The proposed method consists of a simplified plane detection with particle swarm optimization (PSO), region growing (RG), and integrated object plane detection. In this paper, we show that small boxes are detected with low computational cost.

Key Words: PSO, 3D Depth Sensor, Unknown Object Detection, 3D Plane Detection

1. はじめに

近年, 人との共存を目指して様々なロボットの研究や開発が進められている[1]. 人が生活する一般的な環境は非常に複雑なため, ロボットのために作業に必要な情報全てを事前に与えておくことは困難である. しかし, 事前知識を持たない未知環境であっても, ロボットは人のように柔軟に周囲の環境を認識し, 目的の作業を遂行することが求められる.

作業空間における対象物の認識・把持を実現するために, Kinect等に代表される距離画像センサがよく用いられる. 3次元の物体認識において, 3次元形状テンプレートマッチングや特徴点のマッチングによる物体認識手法が提案されてきた[2]-[4]. また, Point Cloud Libraryなど, 距離画像センサによって計測されたポイントクラウドデータを容易に扱うためのライブラリ等も提供されている[5].

しかし, 未知物体を認識しロボットが作業を行う場合, 事前にテンプレートが与えられていない条件では適用不可能である. また, 事前計測によりテンプレートを獲得する場合, テンプレートを獲得するまでロボットが作業をする事はできない. すなわち, ロボットの作業に適用するためには, 未知の物体をリアルタイムに検出し, すぐに作業を遂行する事が求められる.

そこで本研究では事前情報が得られない環境で動作するサービスロボットのために, 実時間処理が可能な未知物体の検出について提案する. 本研究では, 環境が平面の集合であると考え, 3次元空間の距離情報を使用した計算負荷の少ない面検出手法を提案している[11]. しかし, 把持可能な小さい物体を精度良く認識するためには, 小さな面から優先的に検出する事が求められる. 本報告では, 面検出の優先順位を決定するために Particle Swarm Optimization (PSO)を用いて, 把持対象

物体をリアルタイムに精度良く検出できることを目指す.

2. 片付けサービスロボット

Fig.1に本研究で使用している片付けサービスロボットを示す[6]. 移動ロボット台車の上にロボットアームが固定されている. ロボットアームは5軸駆動であり, 1軸のグリッパが搭載されている. 冗長軸が存在しないため, ロボットの把持姿勢は物体の手前から限定されている.

作業空間を3次的に認識するセンサとして, 3次元距離画像センサ (SwissRanger: SR-3000)を使用する. SR-3000は, TOF(Time-of-Flight)方式の距離センサで, 解像度は 176×144 [pixel]であり, 全体で25344方向の膨大な距離情報と輝度情報を一度に計測できる. SR-3000は作業範囲がセンサの画角に収まるようロボットアーム右側に50[cm]の高さで固定した. Fig.1中にSR-3000で机に置かれた箱を計測したスナップショットを示す.

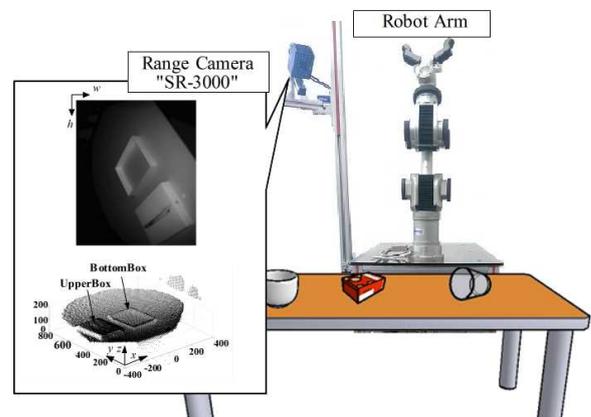


Fig.1 The Service Robot and SR-3000

上側が輝度画像，下側にポイントクラウドデータをプロットしている．物体の凹凸が確認できる程度で計測できているが，詳細に見てみると物体の境界付近ではフィルタにより滑らかに接続されていたり，側面や背面など計測できない箇所に対しても補完がされたりしている．つまり，計測情報そのものが不完全であるため，正確な物体形状を検出して物体認識することが困難である．また，コップや菓子箱サイズのものは，中央に置いた場合で計測点が約 300 点前後となり，画像全体の 1% 程度しかないことが物体認識を困難とする要素となっている．

3. 3次元面検出に基づく未知物体検出

本ロボットアームが未知物体を把持することを前提として，机の上のコップや箱などの小さい物体を検出する手法を提案する．

処理の流れを Fig.2 に示す．3次元距離情報を計測後，PSO を用いた面検出のための候補点探索を行い，簡略型面検出により平面の検出を行う．続いて，時系列的な検出情報を利用した検出面の認識処理，及び面の幾何的な関係に基づいた物体検出処理をする事で，未知物体の点群を抽出する．最後に，物体の点群情報からロボットが把持可能か決定する．本稿では，把持決定手法については割愛し，PSO の候補点探索を行うことで，物体の検出精度を維持しつつ計算負荷の軽減をする手法について議論を行う．

3.1 簡略型面検出

PSO による候補点探索に先立ち，面検出手法について説明する．従来手法である3次元ハフ変換やRANSAC等の手法を用いて3次元面検出を行う場合，計算負荷が増加し，実時間で物体を検出することが困難である[7]．そこで本研究では面の検出に簡略型面検出手法(Simplified Plane Detection: SPD)を用いる[8]．このSPDは従来の面検出手法で行われるような投票プロセスを必要としないため，計算負荷が軽減できる．

以下に距離空間における3次元距離情報を用いた面検出の計算手順を示す．また，Fig.4には3次元距離センサで立方体を計測した場合のモデルを示す．

まず，SR-3000 から得られた3次元距離点群から任意の点を候補点 $P_i = (x_{p,i}, y_{p,i}, z_{p,i})$ として選択する．この候補点と局所近傍の3点がなすベクトルを用いて，平面が存在する可能性を式(1)から評価する．

$$V_i = \left| \begin{array}{ccc} \vec{v}_{i,1} & \vec{v}_{i,2} & \vec{v}_{i,3} \end{array} \right| \quad (1)$$

V_i は，選択された候補点 P_i 周りのベクトル $\vec{v}_{i,1}$, $\vec{v}_{i,2}$, $\vec{v}_{i,3}$ からなる斜方体の体積である．つまり， $V_i \neq 0$ で

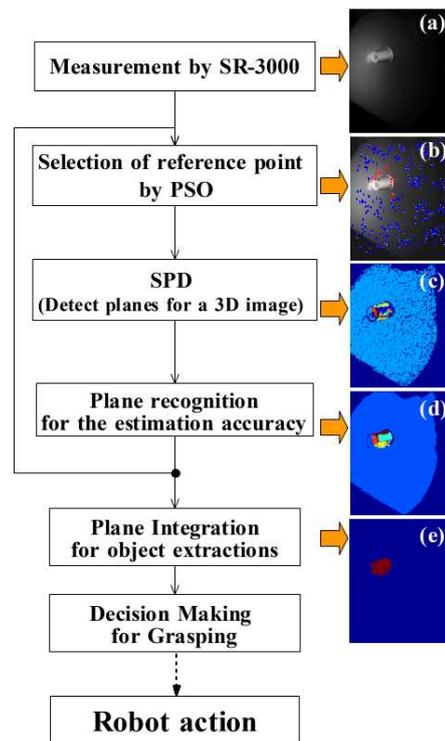


Fig.2 The Flow of Object Detection based on Plane Detection

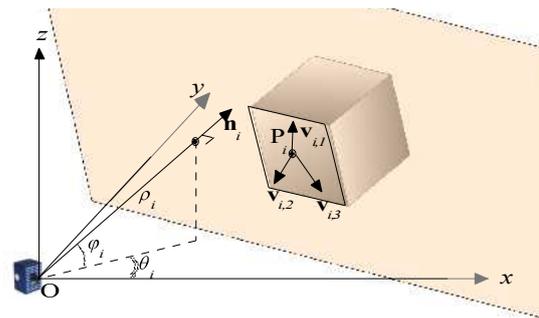


Fig. 3 The model of SPD

あれば候補点は同一平面 Π_i 上にあると判断できる．次に，平面 Π_i の垂直ベクトル $\vec{n}_i = (n_{x,i}, n_{y,i}, n_{z,i})$ を以下の式(2)により算出する．

$$\vec{n}_i = \vec{v}_{1,i} \times \vec{v}_{2,i} \approx \vec{v}_{2,i} \times \vec{v}_{3,i} \approx \vec{v}_{3,i} \times \vec{v}_{1,i} \quad (2)$$

この時， θ_i と φ_i をそれぞれ垂直ベクトル \vec{n}_i の方位角と仰角， ρ_i を原点から平面 Π_i までの垂直距離とおくと，平面 Π_i の姿勢 $[\rho_i, \theta_i, \varphi_i]$ は以下のように計算することができる．

$$\begin{cases} \varphi_i = \sin^{-1}(n_{z,i}) \\ \theta_i = \cos^{-1}\left(\frac{n_{x,i}}{\cos \varphi_i}\right) \\ \rho_i = x_{p,i} \cos \theta_i \cos \varphi_i + y_{p,i} \sin \theta_i \cos \varphi_i + z_{p,i} \sin \varphi_i \end{cases} \quad (3)$$

続いて、平面 Π_i 上に属する点群を領域成長法(Region Growing: RG)によって探索し、平面 Π_i の領域を決定する[9]. 任意候補点 P_i 周りの計測点が平面 Π_i 上に存在するか、式(4)により評価する.

$$\mathbf{n}_{ref} \cdot \mathbf{n}_{ref+k} \cong 1.0 \quad \wedge \quad \rho_{ref} \cong \rho_{ref+k} \quad (4)$$

\mathbf{n}_{ref} は候補点の垂直ベクトル、 \mathbf{n}_{ref+k} は k 番目の探索点の垂直ベクトルを意味している. 式(4)を満たし、探索点が平面 Π_i 上に存在するならば、探索点の周囲の点を新たな探索点として探索を続ける. この探索処理を繰り返し行うことで、同一平面内の計測点の集合を検出する事ができる. そして新たに探索点が見つからなければ面の成長は終了し、平面 Π_i の領域が確定する. さらに新たな候補点 P_{i+1} を選択して同様に計算を繰り返すことで距離空間から複数の平面を検出することが可能である. また、既に面として確定している点は処理をスキップすることで面検出に関する計算量を削減している. 一方、式(4)で候補面上の点を判定する際、一定の幅を許容しているため、例えば最初にテーブル面検出を行った場合、物体上の点群の一部を取り込んでしまうため、物体上の点群が減少し、面を認識できなくなる可能性が生じる. そこで、最初の候補点を検出したい物体上に配置し、物体上の面から優先的に面検出を行う必要がある.

3.2 面検出のための候補点探索と物体検出

必要な面上に候補点を配置するために、PSO による候補点の探索手法を提案する. まず、 N 元探索空間 S 上に、式(5)によって特徴づけられる位置ベクトル \mathbf{x}_n と速度ベクトル \mathbf{v}_n を持つ m 個の粒子を分布する.

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{x}_{mn}(t) &\equiv (x_{m1}, x_{m2}, \dots, x_{mN}) \\ \mathbf{v}_{mn}(t) &\equiv (v_{m1}, v_{m2}, \dots, v_{mN}) \end{aligned} \right\} \in S \quad (5)$$

本研究では計測点が 2 次元の画像のようにピクセルで表現されるため、探索空間 S の次元 N は 2 次元画像上の座標点の 2 次元としている. 続いて、式(6) に示す適合度関数によって粒子の適合度を決定する.

$$\left\{ \begin{aligned} f_i(\mathbf{x}_{mn}(t)) &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \exp\left\{-\frac{(h-hg_i)^2 + (w-wg_i)^2}{2\sigma^2}\right\} \quad (f_i \in \Pi_i) \\ \mu_{mn} &= \max_i(f_i) \end{aligned} \right. \quad (6)$$

hg , wg は 1 サイクル前の面検出によって検出された i 番目の物体面の重心位置を表す. σ は標準偏差である. すなわち、検出された物体面の重心位置を中心としたガウス関数で表現されている. また、面検出がなされた範囲のみ値を持ち、面検出がされていない点は 0 となる.

したがって、面の重心位置に近い粒子が高い適合度をもつ. Fig.2(b)は、粒子の分散と、適合度の高い粒子を赤色で示している. より検出された平面に近い粒子が高い適合度を持つことが分かる. 次に各粒子は適合度を基準に位置ベクトルと速度ベクトルを更新する. 更新は式(7), (8)に従う[10].

$$\mathbf{v}_{mn}(t+\Delta t) = w * \mathbf{v}_{mn}(t) + c_1 * rand_1 * (\mathbf{pbest}_{mn}(t) - \mathbf{x}_{mn}(t)) + c_2 * rand_2 * (\mathbf{lbest} - \mathbf{x}_{mn}(t)) \quad (7)$$

$$\mathbf{x}_{mn}(t+\Delta t) = \mathbf{x}_{mn}(t) + \mathbf{v}_{mn}(t+\Delta t) \quad (8)$$

w と c_1 , c_2 はそれぞれ定数であり、 $rand_1$ と $rand_2$ は $[0,1]$ の一様乱数によって決定する. \mathbf{pbest}_{mn} は m 番目の粒子のこれまでの最良値にあたる粒子位置を表す. また、 \mathbf{lbest} は式(6)によって評価される適合度が最も高い粒子であり、 m 番目の粒子と最も近い位置に存在する粒子である. 各粒子は現在までに発見した自分の最良な位置と近傍の良い位置にある粒子との関係から速度を決定し、自己位置を更新する. 結果として各粒子は互いの位置をやりとりし、検出面付近に位置する粒子の周囲に集まる.

この粒子のうち、適合度が高い粒子から順に面検出のための面検出の候補点として SPD を適用することで、小さな物体面から優先的に面検出が可能となる.

一方、探索が進むと適合度の高い粒子近傍に複数の粒子が近接する. SPD では、面として認識された点群は次の面検出処理から排除するため、粒子が一箇所に集まると無駄が多くなる. このため、 \mathbf{lbest} 近傍の粒子の速度ベクトルは乱数により更新している.

さらに、物体面が一定数検出されない場合は、適合度の低い粒子の一部を乱数によって初期化することで、粒子の局所集中を回避し、かつ計測範囲全体にも注意を払うことができる.

3.3 面検出に基づく物体検出

PSO を用いた面検出処理により、直面した環境での面検出結果は、Fig.2 (c)のような結果となる. 検出結果は、検出面ごとに色分けして示しており、色そのものには意味は無い. コップの曲面を複数の平面として検出できていることが分かる. しかし、センシングの揺らぎやノイズの影響などから、本来一様に平面である机面に抜けがあったり、認識できない面が存在したりしている. また、同じ環境や同じ物体を計測している場合でも常に一定の検出結果が得られない.

そこで、確度パラメータを導入することで時系列的な見えの変化を考慮している[6]. これにより、センシングの揺らぎやノイズが原因で起こる瞬間的な誤認識の

影響を抑えることが可能である。SPD に確度パラメータを適用した結果が Fig.2 (d) である。Fig.2 (d)に示すように本来一つの物体が複数の面に分かれて検出された場合、実際の作業時にはひとかたまりの物体として解釈する必要がある。そこで、3次元における平面の幾何的性質に基づいた物体の検出方法を適用する。平面の方程式を元に、隣り合う面を探索し、接する面同士を統合することでひとかたまりの物体として検出する。統合された結果、一つの物体として認識できている (Fig.2(e)).

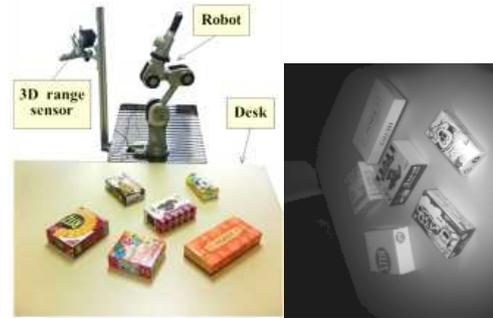


Fig. 4 Experimental Condition

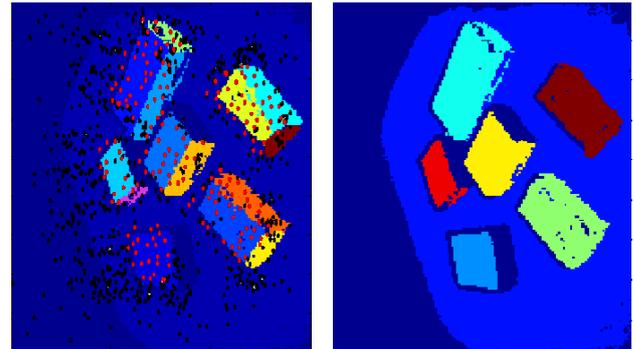
4. 未知物体の検出実験

3.3 実験条件

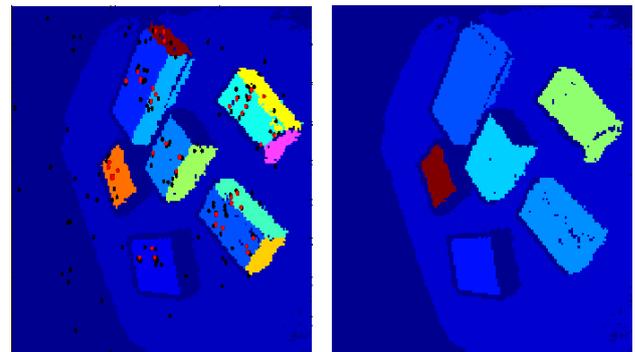
提案手法を用いて複数の未知物体を検出する実験を行った。Fig.4 に実験環境を示す。乱雑に 6 個の異なる大きさの箱が置かれている。ただし、ロボットには物体に関する事前情報は一切与えていないため、ロボットにとって机面の位置以外の全てが未知となる。実験では、PSO のパラメータ c_1 , c_2 , w をそれぞれ 0.2, 0.2, 0.5 とする。PSO の粒子数を 1000, 200, 50 としたときの面認識・物体認識の結果と計算負荷について検討をする。

Fig.5 に粒子数を 1000 で探索が十分に進んだときの面検出と物体検出の結果を示す。Fig.5(a)は PSO の粒子の分散と面検出の結果を示している。適合度の高い粒子上位 20%を赤色, その他を黒色で表示している。Fig.5(b)は, 面検出結果を統合して物体検出に関する結果である。同様に, Fig.6 に粒子数を 200 で探索が十分に進んだときの結果, Fig.7 に粒子数を 50 で探索が十分に進んだときの結果を示す。

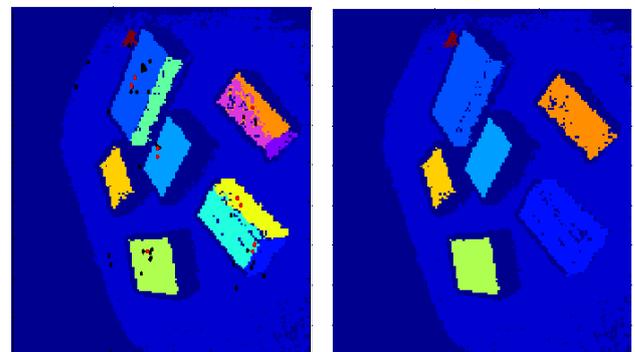
粒子数が多いほど多くの面が検出できているが, 粒子数を 50 にしても大きな面だけは検出できており, 物体の大きさや配置を識別可能な結果が得られている。また, 粒子数を多く取ると探索範囲全体に粒子が分布している。実際に面検出の候補点として使用された粒子は平均 160 点となり, 800 点以上が不要な粒子となっているため無駄が多い。一方, 粒子数 200 の時は, 各面における適合度の高い粒子が 3~5 点となっており, バランスよく分散しているように観察できるが, 平均 58 点の粒子が面検出に利用されていた。面検出に使われる粒子数に大きな差が生じた理由として, 粒子数 1000 の時は密に分散した結果, (1)式で平面と判定されない位置にも粒子が多く配置されたため, 候補点が増えたと考えられる。粒子数 200 の時は, 観察されているとおり, 各面の上に 3 点程度配置されており, 3 点のうちいずれかが面検出で利用されているため, 面検出に使われた粒子数も全体の 28.9%と観察結果とも一致してい



(a)Plane Detection (with Particles) (b)Object Detection
Fig.5 Experimental Result (Particles: 1000)



(a)Plane Detection (with Particles) (b)Object Detection
Fig.6 Experimental Result (Particles: 200)



(a)Plane Detection (with Particles) (b)Object Detection
Fig.7 Experimental Result (Particles: 50)

る。粒子数 50 の時は、面検出に使用された粒子数は平均 13.7 点(27.3%)となった。すなわち、各面につき 1 粒子で対応している。このため、フレーム毎の面検出結果が安定しない問題もあった。今回の実験環境で安定した面検出/物体検出をするためには、粒子数は 200 以上必要であると推察できる。

次に、粒子数による計算時間について Table.1 に示す。計算時間は 5 秒間(50 ステップ)連続で処理をしたときの 1 ステップ(Fig.2 の PSO による候補点探索から物体検出まで)あたりの平均計算時間を示している。PSO は Fig.2 の PSO の算出のみ、ObjectDetection は SPD、面の統合、物体検出をまとめた計算時間を示している。なお、実験で使用した計算機の仕様は、CPU が core i7, 5600U@2.60GHz, RAM メモリが 8GB であり、ソフトウェアは MATLAB/Simulink である。

粒子数 200 の場合、物体検出の精度と安定性は粒子数 1000 とほぼ同等にもかかわらず、計算時間は 100% 高速となった。また、粒子数と計算時間の関係において、特に、PSO の演算において計算時間に顕著な差がある。検出すべき環境の複雑さにあわせて、粒子数の調整を行うことで、認識の精度と計算負荷のバランスを調整可能であると考ええる。

5. まとめ

本稿では、3次元距離画像センサを搭載したロボットの物体把持のための未知物体検出について議論を行った。未知物体を高速に検出するために、領域成長法を適用した簡略型面検出と PSO による面候補点の探索を適用した。

複数の未知物体が置かれた環境での実験を通して、PSO の粒子数と面検出の精度および計算負荷に関して議論を行った。特に、PSO の粒子数は物体検出の精度向上と計算時間削減に大きく寄与するパラメータとなっている。よって、検出すべき環境の複雑さにあわせて、粒子数の調整を行うことで、認識の精度と計算負荷のバランスを調整可能であると考ええる

参 考 文 献

[1] M.Beetz, U.Klank, I.Kresse, A.Maldonado, L.Mosenlechner, D.Pangercic, T. Ruhr, M.Tenorth: "Robotic roommates making pancakes" 11th IEEE-RAS International Conference on Humanoid Robots, pp529-536, 2011.

[2] F.Jurie, M.Dhome: "Real time 3D template matching", Proceedings of the 2001 IEEE Computer Society Conference on Computer Vision and Pattern Recognition, vol.1, pp.I-791-796, 2001.

[3] X.Zhou, B.He, and Y.F.Li, "A Novel View Planning Method for Automatic Reconstruction of Unknown 3-D

Table 1 Computational Costs of each condition

Condition of PSO	Computational Time[ms]		
	PSO	Object Detection	Total
Particles:1000	21.8	23.5	45.3
Particles:200	1.2	21.4	22.6
Particles:50	0.2	16.2	16.4

Objects Based on the Limit Visual Surface", IEEE ICIG, Xian, Shanxi, China, pp.301-306, 2009.

[4] A.G.Lowe: "Distinctive image features from scale-invariant key points", Proceedings of International Journal of Computer Vision (IJCV), 60(2) pp.91-110, 2004.

[5] PCL-Point Cloud Library, <http://pointclouds.org/>

[6] 増田寛之, 林憲玉, "距離画像を用いた未知物体認識のための網膜モデルに基づく面検出", 日本ロボット学会誌, Vol.32, No.1, pp.65-73, 2014.

[7] M.A.Fischler and R.C.Bolles: "Random Sample Consensus: A Paradigm for Model Fitting with Applications to Image Analysis and Automated Cartography", Communications of the ACM, Vol 24, Issue 6, pp 381-395, 1981.

[8] H.Masuta, S.Makino, H.Lim, "Simplified Plane Detection Method in 3D space for Unknown Object Detection", the Fourth International Workshop on Advanced Computational Intelligence and Intelligent Informatics(IWACIII 2014), RS2-2, 2014.

[9] R.Adams, L.Bischof: "Seeded Region Growing", IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, Vol.16, pp. 641-647, 1994.

[10] J. Kennedy, R. C. Eberhart: "Particle swarm optimization", In Proceedings of the 1995 IEEE International Conference on Neural Networks", Vol. 4, pp. 1942-1948, 1995.

Analysis of Bracing-Constraint Dynamics with Energy-efficient for Elbow-bracing Manipulator

X. Li¹ M. Minami¹ *H. Han² and Y. Wei²

(1 Okayama University 2 Harbin Engineering University)

Abstract– The configuration of elbow-bracing is built by imitating human’s handwriting behavior that human can do accurate task with less consumption energy by bracing the elbow or hand on the task. In this paper, first, the motion equation of the elbow-bracing manipulator under constrained condition has been derived. Second, as the consumption energy is calculated based on the voltage and current of the motor, the equation of motion of the motor has been proposed. Then, a control method based on the constraint dynamics of the elbow-bracing manipulator is proposed to simultaneously control constraint force and hand’s trajectory and elbow-bracing position in work space. Moreover, we focus on the energy-efficient of the elbow-bracing manipulator, and analysis the factors which have a great effect on the consumption energy, i.e. elbow-bracing position, constraint force. Finally, a simulation experiment for 5-link elbow-bracing manipulator tracking spatial trajectory has been conducted which reveals the effectiveness of energy-efficiency and high accuracy for the elbow-bracing manipulator and presents the relationship of the above two factors to the energy-efficiency.

Key Words: Elbow-bracing manipulator; Constraint dynamics; constraint force control ; Energy-efficient

1 Introduction

Humans can write characters accurately on a paper with less power by bracing and restricting the wrist, as shown in Fig.1. Moreover, this bracing strategy may overcome the hindrances of hyper-redundant manipulators being too heavy to spare the hand payload for desired tasks.



Fig. 1: Human’s writing motion utilizing bracing wrist

Roy and Whitcomb¹⁾ categorized motions and control methods of constrained robot as (a) model based control^{2) 3)} that assume undeformable robots and deformable environments, and (b) methods based on position/velocity control⁴⁾ that assume undeformable robots and also deformable environments. Park and Khatib^{5) 6)} proposed kinematics model of plural contact to control constraint motion in category (b). Finally, there is classification of (c) control method⁷⁾ that assume undeformable robots and undeformable environments. Yamane and Nakamura proposed walking of humanoid robot⁸⁾ and a concept of dynamics filter⁹⁾ in this category. Effectiveness and accuracy of hyper-redundant manipulators subject to constraint on environments have been discussed, West and Asada¹⁰⁾ proposed common contact mode of kinematics for designing position/force simultaneous controller of manipulator in constraint motion.

In this paper, considering the control method of undeformable robots and undeformable environments.

Under these conditions, algebraic equation can be derived from constraint condition and equation of motion as (1).

$$\mathbf{A}\mathbf{f}_n = \mathbf{a} - \mathbf{B}\boldsymbol{\tau} \quad (1)$$

\mathbf{f}_n is constraint force, \mathbf{A} , \mathbf{a} and \mathbf{B} are vector and matrices that will be defined in the next section, $\boldsymbol{\tau}$ is a vector of input torques. Eq.(1) shows an algebraic relation between input torques and constraint force when robot’s hand is subject to constraint. The above equation has been derived by Hemami and Wyman¹¹⁾ in discipline of biped walking, and applied by Peng and Adachi¹²⁾ in discipline of force/position control by robots at the beginning. Peng considered that $\boldsymbol{\tau}$ is input and \mathbf{f}_n is output, and Eq.(1) was used as force sensor to detect \mathbf{f}_n . Despite the nature that the robot motions under a condition of (c) undeformable robot and undeformable environment be subject to the algebraic equation, Eq.(1), researches on robot force control in category (c) seems to be not based on the Eq.(1) except Peng as far as we know. In this paper, Eq.(1) is used for calculating input torque $\boldsymbol{\tau}$ to accomplish desired constraint force \mathbf{f}_{nd} contrary to Peng’s idea. Considering the hand writing motion, we know that too much pushing the wrist to table bears fatigue and meaningless, and also too less pushing makes us tired too. This suggests a hypothesis that appropriate supporting force exists, and also effective bracing position may exist.

In the past of this research, the control of constraint motion has been applied to many robots. The grinding robot that has been researching by Minami and Adachi¹³⁾, the hand of robot is constrained to a changing surface to grinding a target object into desired shape with force-sensorless feed-forward control. And the bracing control also be used to a mobile robot with redundant manipulator and the bracing manip-

ulator that have been researching by Washino and Minami¹⁴⁾, Kondo and Itoshima¹⁵⁾ to maintaining the balance of the mobile robot or conserve energy of the redundant manipulator. Xiang Li, et al.¹⁶⁾ derive the dynamical equation for humanoid robot using Extended Newton-Euler and discuss its walking models, such as slipping, bumping, surface-contacting and point-contacting of foot.

In this paper, we focus on the energy-efficient of the elbow-bracing manipulator through two factors, i.e. elbow-bracing position and constraint force. In section 2, the motion equation of elbow-bracing manipulator with constrained force and motor has been derived. In section 3, PD controller has been used to achieve the task for the elbow-bracing manipulator. In section 4, a simulation experiment for a 5-link elbow-bracing manipulator has been conducted. Finally, we give our conclusion.

2 Motion equation with constraint and motor for elbow-bracing manipulator

2.1 Constrained condition

As shown in Fig.2, the intermediate links of an n -link manipulator are contacted with the environment at p points.

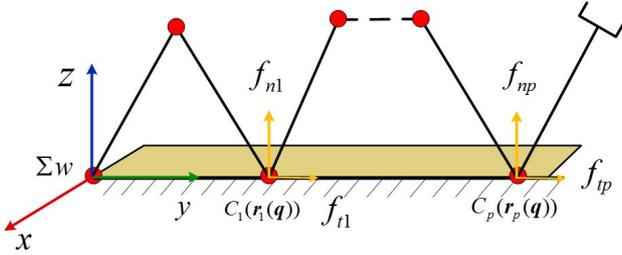


Fig. 2: Constrained model of the elbow-bracing manipulator

The constraint function is expressed as,

$$\begin{aligned} \mathbf{C}(\mathbf{r}(\mathbf{q})) &= [C_1(\mathbf{r}_1(\mathbf{q})), C_2(\mathbf{r}_2(\mathbf{q})), \dots, C_p(\mathbf{r}_p(\mathbf{q}))]^T \\ &= \mathbf{0} \end{aligned} \quad (2)$$

Here, $\mathbf{q} \in \mathbf{R}^n$ is joint angle vector with n joints, $\mathbf{r}_i \in \mathbf{R}^m$ ($m < n$) is i -th link position that is subject to constraint. The relation between \mathbf{r}_i and \mathbf{q} and the relation between $\dot{\mathbf{r}}_i$ and $\dot{\mathbf{q}}$ are expressed as,

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_i(\mathbf{q}) \quad (3)$$

$$\dot{\mathbf{r}}_i = \mathbf{J}_i(\mathbf{q})\dot{\mathbf{q}}, \quad \mathbf{J}_i(\mathbf{q}) = [\tilde{\mathbf{J}}_i(\mathbf{q}), \mathbf{0}]. \quad (4)$$

In (4), \mathbf{J}_i is $m \times n$ matrix, $\tilde{\mathbf{J}}_i$ consists of $m \times i$ matrix and zero submatrix $\mathbf{0}$ with $m \times (n - i)$.

In the formulation of constraint motion of robot, we consider that a plural intermediate links are contacting with the environment. In Fig.2, a generalized surface can be defined with the position constraints along the tangents to this surface and force

constraints along the normals. Then the unit vectors of normals, \mathbf{j}_{cci} , which represent direction of constraint forces, $\mathbf{f}_n = [f_{n1}, f_{n2} \dots f_{np}]^T$, and the unit vectors of tangents, \mathbf{j}_{tti} , which represent direction of friction forces, $\mathbf{f}_t = [f_{t1}, f_{t2} \dots f_{tp}]^T$, are expressed as,

$$\mathbf{j}_{cci} = \left(\frac{\partial \mathbf{C}_i}{\partial \mathbf{r}^T} \right)^T / \left\| \frac{\partial \mathbf{C}_i}{\partial \mathbf{r}^T} \right\| \quad (5)$$

$$\mathbf{j}_{tti} = \frac{\dot{\mathbf{r}}_i}{\|\dot{\mathbf{r}}_i\|} \quad (6)$$

2.2 Motion equation with constraint

As we known, the jacobian transpose maps Cartesian forces into equivalent joint torques. Then, we define that,

$$\mathbf{j}_{ci}^T = \mathbf{J}_i(\mathbf{q})^T \mathbf{j}_{cci} = \left(\frac{\partial \mathbf{C}_i}{\partial \mathbf{q}^T} \right)^T / \left\| \frac{\partial \mathbf{C}_i}{\partial \mathbf{r}^T} \right\| \quad (7)$$

$$\mathbf{j}_{ti}^T = \mathbf{J}_i(\mathbf{q})^T \mathbf{j}_{tti} = \left(\frac{\partial \mathbf{r}_i}{\partial \mathbf{q}^T} \right)^T \frac{\dot{\mathbf{r}}_i}{\|\dot{\mathbf{r}}_i\|} \quad (8)$$

$$\mathbf{J}_c^T = [\mathbf{j}_{c1}^T, \mathbf{j}_{c2}^T, \dots, \mathbf{j}_{cp}^T] \quad (9)$$

$$\mathbf{J}_t^T = [\mathbf{j}_{t1}^T, \mathbf{j}_{t2}^T, \dots, \mathbf{j}_{tp}^T] \quad (10)$$

\mathbf{J}_c^T , \mathbf{J}_t^T are $n \times p$ matrices, and \mathbf{f}_n , \mathbf{f}_t are $p \times 1$ vectors. Using above definitions, equation of motion of the manipulator subject to constraints at p points is expressed as

$$\begin{aligned} & \mathbf{M}(\mathbf{q})\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{h}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) + \mathbf{g}(\mathbf{q}) + \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}} \\ &= \boldsymbol{\tau} + \sum_{i=1}^p (\mathbf{j}_{ci}^T \mathbf{f}_{ni}) - \sum_{i=1}^p (\mathbf{j}_{ti}^T \mathbf{f}_{ti}) \\ &= \boldsymbol{\tau} + \mathbf{J}_c^T \mathbf{f}_n - \mathbf{J}_t^T \mathbf{f}_t \end{aligned} \quad (11)$$

Differentiating (2) with respect to time t twice, constraint condition of $\ddot{\mathbf{q}}$ is set up like

$$\dot{\mathbf{q}}^T \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \right] \dot{\mathbf{q}} + \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \ddot{\mathbf{q}} = \mathbf{0} \quad (12)$$

The solution of (11) that is $\dot{\mathbf{q}}$ and \mathbf{q} must satisfy (12) disregarding time t that the manipulator be always subject to constraint. When the $\ddot{\mathbf{q}}$ satisfying (12) and the $\ddot{\mathbf{q}}$ in (11) is equal to each other, the solution $\mathbf{q}(t)$ in (11) satisfies (2) regardless of time.

Here, the relation between constraint force \mathbf{f}_n and friction force \mathbf{f}_t is shown in the following equation with coefficients of sliding friction.

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_t &= \mathbf{K} \mathbf{f}_n, \quad \mathbf{K} = \text{diag}[K_1, K_2, \dots, K_p] \\ &0 < K_i < 1, (i = 1, 2, \dots, p) \end{aligned} \quad (13)$$

Therefore, Eq.(11) can be translated into the following equation.

$$\begin{aligned} & M(\mathbf{q})\ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{h}(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) + \mathbf{g}(\mathbf{q}) + \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}} \\ &= \boldsymbol{\tau} + (\mathbf{J}_c^T - \mathbf{J}_t^T \mathbf{K}) \mathbf{f}_n \end{aligned} \quad (14)$$

In order to obtain the relationship between $\boldsymbol{\tau}$ and \mathbf{f}_n , such as (1), we combine (12) and (14) to eliminate $\ddot{\mathbf{q}}$. First, we define

$$\mathbf{M}_c \triangleq (\partial \mathbf{C} / \partial \mathbf{q}^T) \mathbf{M}^{-1} (\partial \mathbf{C} / \partial \mathbf{q}^T)^T \quad (15)$$

$$\mathbf{B} \triangleq \left\| \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{r}^T} \right\| \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \mathbf{M}^{-1} \quad (16)$$

$$\mathbf{a} \triangleq \mathbf{B} \{ \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{h} + \mathbf{g} \} - \left\| \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{r}^T} \right\| \dot{\mathbf{q}}^T \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \right] \dot{\mathbf{q}} \quad (17)$$

$$\mathbf{A} \triangleq \mathbf{M}_c - \mathbf{B} \mathbf{J}_t^T \mathbf{K} \quad (18)$$

Then,

$$\begin{aligned} & \dot{\mathbf{q}}^T \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \right] \dot{\mathbf{q}} + \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{h} \\ & + \mathbf{J}_t^T \mathbf{K} \mathbf{f}_n + \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{g} - \boldsymbol{\tau} - \mathbf{J}_c^T \mathbf{f}_n) = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{M}_c \mathbf{f}_n \\ &= \left\| \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{r}^T} \right\| \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{J}_t^T \mathbf{K} \mathbf{f}_n + \mathbf{D}\dot{\mathbf{q}} + \mathbf{h} \\ & + \mathbf{g} - \boldsymbol{\tau}) - \left\| \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{r}^T} \right\| \dot{\mathbf{q}}^T \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \right] \dot{\mathbf{q}} \\ &= \mathbf{B} \mathbf{J}_t^T \mathbf{K} \mathbf{f}_n - \mathbf{B} \boldsymbol{\tau} + \mathbf{a} \end{aligned} \quad (20)$$

Finally, we can get (1). And we assume that \mathbf{A} is positive definite matrix. Therefore, \mathbf{f}_n can be expressed as,

$$\mathbf{f}_n = \mathbf{A}^{-1} (\mathbf{a} - \mathbf{B} \boldsymbol{\tau}) \quad (21)$$

2.3 Equation of Motor

To represent the motion of each motor, the following symbols are used.

v_i is the voltage of the motor, $\mathbf{v} = [v_1, v_2, \dots, v_l]^T$;

i_i is the current of the motor, $\mathbf{i} = [i_1, i_2, \dots, i_l]^T$;

v_{gi} is the back EMF of the motor;

R_i is the resistance of the motor;

L_i is the inductance of the motor;

θ_i is the rotational angle of the motor;

τ_{gi} is the electromagnetic torque of the motor;

τ_{Li} is the load torque of the motor;

I_{mi} is the inertia of the motor;

K_{Ei} is the coefficient of the back EMF;

K_{Ti} is the coefficient of the electromagnetic torque;

d_{mi} is the viscous friction coefficient of the reducer;

k_i is the reduction ratio of the reducer;

As the DC motor is considered in this paper, the

coefficients, K_{Ei} and K_{Ti} are equal. And we assume that

$$K_{Ti} = K_{Ei} = K_i \quad (22)$$

The relationship between the parameters of the motor can be expressed as the following equations

$$v_i(t) = L_i \dot{i}_i + R_i i_i(t) + v_{gi}(t) \quad (23)$$

$$v_{gi}(t) = K_{Ei} \dot{\theta}_i(t) \quad (24)$$

$$I_{mi} \ddot{\theta} = \tau_{gi}(t) - \tau_{Li}(t) - d_{mi} \dot{\theta}_i \quad (25)$$

$$\tau_{gi}(t) = K_{Ti} i_i(t) \quad (26)$$

As the reduction ratio of the reducer is k_i , the following equations can be obtained.

$$\theta_i = k_i q_i \quad (27)$$

$$\tau_{Li} = \frac{\tau_i}{k_i} \quad (28)$$

Based on the above equations, we can obtain the equation of motor.

$$L_i \frac{di_i}{dt} = v_i - R_i i_i - K_i k_i \dot{q}_i \quad (29)$$

$$\tau_i = -I_{mi} k_i^2 \ddot{q}_i + K_i k_i i_i - d_{mi} k_i^2 \dot{q}_i \quad (30)$$

The equation of motor can be rewritten in the form of vector, as shown in the following equations.

$$\mathbf{L} \frac{d\mathbf{i}}{dt} = \mathbf{v} - \mathbf{R} \mathbf{i} - \mathbf{K}_m \dot{\mathbf{q}} \quad (31)$$

$$\boldsymbol{\tau} = -\mathbf{J}_m \ddot{\mathbf{q}} + \mathbf{K}_m \mathbf{i} - \mathbf{D}_m \dot{\mathbf{q}} \quad (32)$$

Where

$$\mathbf{R} = \text{diag}[R_1, R_2, \dots, R_l], \mathbf{L} = \text{diag}[L_1, L_2, \dots, L_l]$$

$$\mathbf{K}_m = \text{diag}[K_{m1}, K_{m2}, \dots, K_{ml}], K_{mi} = K_i k_i$$

$$\mathbf{J}_m = \text{diag}[J_{m1}, J_{m2}, \dots, J_{ml}], J_{mi} = I_{mi} k_i^2$$

$$\mathbf{D}_m = \text{diag}[D_{m1}, D_{m2}, \dots, D_{ml}], D_{mi} = d_{mi} k_i^2$$

The consumption energy can be expressed as the following equation.

$$E_i(T) = \int_0^T v_i(t) i_i(t) dt \quad (33)$$

2.4 Motion equation of manipulator including motor under constraint condition

By combining (12),(14) and (31), and substituting (32) into (14), we can obtain the motion equation of manipulator including motor under constraint condition, as shown in the following equation.

$$\begin{aligned} & \begin{bmatrix} \mathbf{M} + \mathbf{J}_m & -(\mathbf{J}_c^T - \mathbf{J}_t^T \mathbf{K}) & \mathbf{0} \\ \frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{L} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ddot{\mathbf{q}} \\ \mathbf{f}_n \\ d\mathbf{i}/dt \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \mathbf{K}_m \mathbf{i} - \mathbf{h} - \mathbf{g} - (\mathbf{D} + \mathbf{D}_m) \dot{\mathbf{q}} \\ -\dot{\mathbf{q}}^T \left[\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \left(\frac{\partial \mathbf{C}}{\partial \mathbf{q}^T} \right) \right] \dot{\mathbf{q}} \\ \mathbf{v} - \mathbf{R} \mathbf{i} - \mathbf{K}_m \dot{\mathbf{q}} \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (34)$$

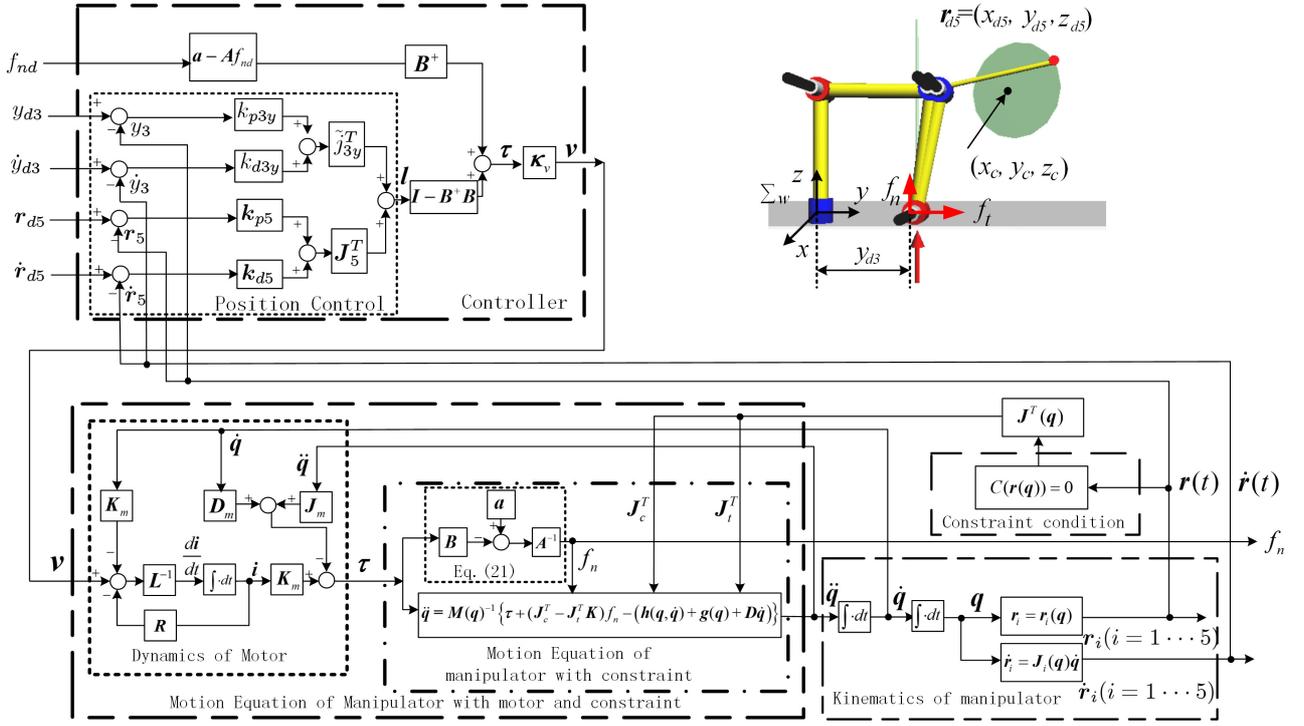


Fig. 3: Block diagram of control for 5-link elbow-bracing manipulator

3 Control method

Based on (1), the control law of the torque τ for the 4-link elbow-bracing manipulator is shown in the following equation.

$$\tau = B^+(a - Af_{nd}) \quad (35)$$

Where, B^+ is pseudo inverse matrix.

Noticed that the direction in which the position vector are constrained are complementary to the direction in which the constrained force is constrained. By dividing the workspace into two orthogonal domains, a position domains and a force domain, which are complementary to the directions of the corresponding constraints, in each of the two domains, position or force can be controlled independently and arbitrarily. Therefore, in order to simultaneously control the constraint force and position, the following equations can be obtained.

$$\tau = B^+(a - Af_{nd}) + (I - B^+B)l. \quad (36)$$

Where, $\text{rank}(I - B^+B)$ equals $n - p$. Because $I - B^+B$ is non-dimensional matrix, l has dimensions of torque. Considering l to be new input, l can be used to track target trajectory of hand r_{d5} and control bracing position through null-space $I - B^+B$ of B^+ . By the nature of pseudo inverse matrix, adding any value to l has no influence on achieving f_{nd} . So, the task of tracking trajectory and the task of achieving f_{nd} can be achieved in decoupled nature.

Here, a method to determine l is discussed. In the

simulation to utilize 5-link manipulator in this paper, one degree of freedom is used for force control of elbow, one degree is for contacting position control of elbow and three degrees are for three-dimensional position control of hand.

$$l = \tilde{j}_{3y}^T [K_{p3y}(y_{d3} - y_3) + K_{d3y}(\dot{y}_{d3} - \dot{y}_3)] + J_5^T [K_{p5}(r_{d5} - r_5) + K_{d5}(\dot{r}_{d5} - \dot{r}_5)] \quad (37)$$

Here, \tilde{j}_{3y}^T is the first column vector that comprises \tilde{j}_3^T defined in Eq.(4). K_{p3y} and K_{d3y} are control gains of position and velocity in y axis direction of 2nd link that is shown in Fig.4, J_5 is Jacobian matrix defined by Eq.(4) when $i = 5$, and K_{p5} and K_{d5} are control gain matrices of position and velocity of fourth link.

Equation(36) can be realizable in the case that robots are driven by DD motors, but the input of usual DC motor is driven by voltage input. In this paper, the following equation that gives input voltage v to the DC motors is used instead of the controller of (36), where K_v is coefficient matrix to convert torque into voltage.

$$v = K_v [B^+(a - Af_{nd}) + (I - B^+B)l] \quad (38)$$

The block diagram of the control method for 4-link elbow-bracing manipulator is shown in Fig.3. The output of the controller v is considered as the input of the motor which also includes joint angular velocity \dot{q} and angular acceleration \ddot{q} that are the outputs of the

manipulator. And the output of the motor is τ which is the input of the 4-link elbow-bracing manipulator. As the second link of the manipulator is subject to the constraint surface, the constraint force in normal direction of the surface, which is made up of \mathbf{J}_c^T and f_n , and the friction force in the tangent direction of the surface, which is made up of \mathbf{J}_t^T and Kf_n are added to the motion equation of the manipulator. The formula to calculate the constraint force f_n is given by (21) which guarantee that the motion of the elbow-bracing manipulator satisfies the constraint condition of (2), which is the merit of this paper.

In Fig.3, the definition of \mathbf{B} , \mathbf{a} and \mathbf{A} are shown in (16), (17) and (18). \mathbf{B}^+ , $\mathbf{I} - \mathbf{B}^+\mathbf{B}$ are introduced in the former section.

4 Simulation for 5-link elbow-bracing manipulator

4.1 The model of 5-link elbow-bracing manipulator

The model of 5 links manipulator shown in Fig. 4.

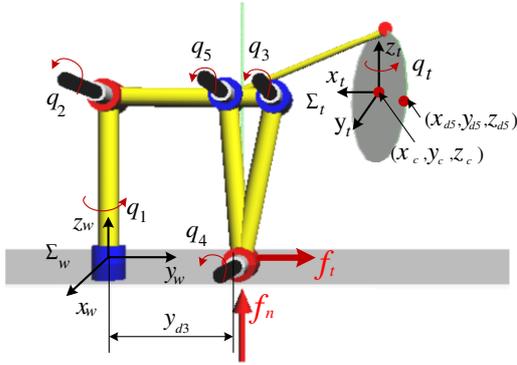


Fig. 4: Simulation model of 5-link elbow-bracing manipulator

In the initial period($t = 0$), the coordinate system of Σ_t has the same orientation of Σ_w , and hand target trajectory is given as the following equations. T is the motion cycle.

$$x_d(t) = x_c \quad (39)$$

$$y_d(t) = r \cos \frac{2\pi}{T}t + y_c \quad (40)$$

$$z_d(t) = r \sin \frac{2\pi}{T}t + z_c \quad (41)$$

where, $r = 0.2[m]$, $(x_c, y_c, z_c) = (0, 0.8, 0.5)[m]$, $T = 5[s]$.

During the motion period($t > 0$), the coordinate system of Σ_t is rotating about z_t -axis with rotational angle q_t ($q_t = 2\pi t/T$).

4.2 Simulation experiment

Link's weight is $m_i = 1.0$ [kg], link's length is $l_i = 0.5$ [m], viscous friction coefficient of joint is $D_i = 2.9$ [$N \cdot m \cdot s/rad$], torque constant is $K_i = 0.2$ [$N \cdot m/A$], resistance is $R_i = 0.6$ [Ω], inductance is $L_i = 0.1$ [H],

inertia moment of motor is $I_{mi} = 1.64 \times 10^{-4}$ [$kg \cdot m^2$], reduction ratio is $k_i = 3.0$ and viscous friction coefficient of reducer is $d_{mi} = 0.1$ [$N \cdot m \cdot s/rad$]($i = 1, 2, 3, 4, 5$).

4.2.1 Analysis of energy-efficiency

The task for the 5-LINK manipulator is tracking spatial trajectory which is described in the former part. As three degrees of freedom are used for the three-dimensional position of manipulator's end-effector to achieve spatial trajectory tracking, it has redundancy for 5-link manipulator without constraint to track three-dimensional trajectory. However, in our model of 5-link elbow-bracing manipulator, the other two degrees of freedom are used to control the elbow-bracing position y_{d3} and constraint force f_{nd} , which, simultaneously decreases the effect of link's gravity during trajectory tracking. Therefore, the tracking accuracy for manipulator with constraint is higher than the manipulator without constraint. What's more, it is more energy-efficient.

As it valid deems that the transient responses from initial condition should be ingored, the time of which is $3s$ [17], energy consumption $E^*(T)$ after $t = T = 5[s]$ defined by following equations are utilized to evaluate the influence of elbow-bracing position and constraint force. Moreover, the constraint force is $40[N]$, and the elbow-bracing position is $0.4[m]$.

$$E_i^*(T) = \int_T^{3T} v_i(t) i_i(t) dt, \quad (42)$$

$$E^*(T) = \sum_{i=1}^5 E_i^*(T). \quad (43)$$

Then the comparisons of energy consumption and tracking error for manipulators with bracing elbow and without bracing elbow are shown in Fig.5 and Fig.6, separately.

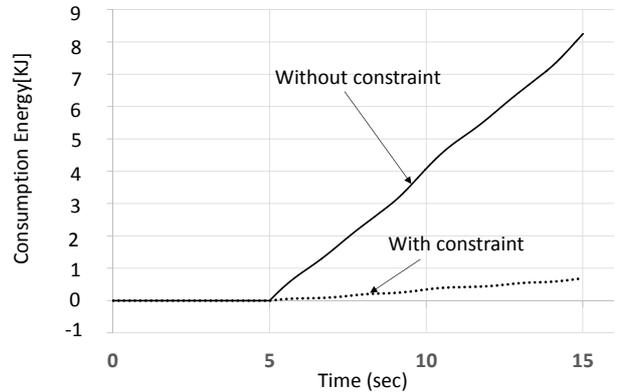


Fig. 5: Consumption energy for 5-link manipulator with 3rd link bracing and without 3rd link bracing

From Fig.5, it is known that energy consumption is reduced by 1/9 when bracing elbow in comparison

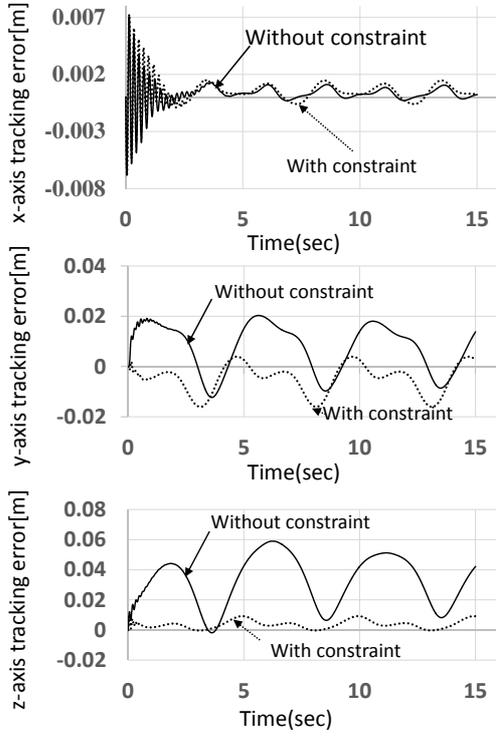


Fig. 6: Tracking error for 5-link manipulator with 3rd link bracing and without 3rd link bracing

with no bracing, which displays the drastic effectiveness of bracing elbow. From Fig.6, it is known that the tracking error in y -axis and z -axis for manipulator with constraint are obviously less than the tracking error for manipulator without constraint. Therefore, the model of the 5-link elbow-bracing manipulator in this paper is energy-efficient and holds high accuracy.

4.2.2 Analysis of the factors which influence the consumption energy

It is known that five variables are controlled by the control law as shown in Eq.(36), and two of which are the constraint force f_{nd} and elbow-bracing position y_{d3} . Therefore, the simulation of consumption energy for 5-link manipulator in the influence of these two factors is considered.

Fig.7 shows the range of y_{d3} during the process of $q_t = 0$. Based on Fig.7, the range of y_{d3} can be calculated by the following equations.

$$\begin{aligned} \min(y_{d3}) &= y_c + r - \sqrt{(l_4 + l_5)^2 - z_c^2} \quad (44) \\ &\approx 0.14[m] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \max(y_{d3}) &= \sqrt{(l_2 + l_3)^2 - l_1^2} \quad (45) \\ &\approx 0.86[m] \end{aligned}$$

Then, the simulation is conducted under the condition that the elbow-bracing position y_{d3} is changing as $0.2, 0.3 \dots 0.8[m]$, and the constraint force f_{nd} is changing as $20, 25 \dots 60[N]$, and $T = 5[s]$. The 3-D figure of the consumption energy during time $t = [T, 3T][s]$ with both elbow-bracing position and constraint force changing is shown in Fig.8.

In Fig.8, it is known that the consumption energy is

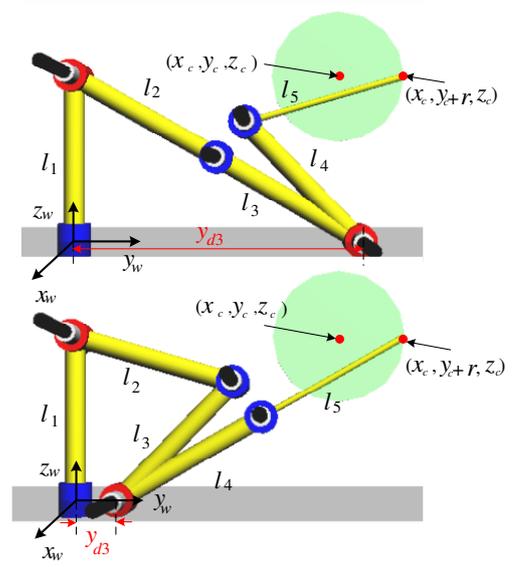


Fig. 7: Range of y_{d3}

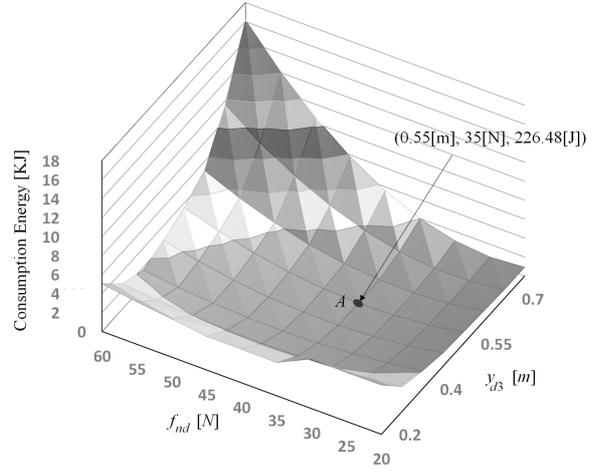


Fig. 8: Consumption energy with both elbow-bracing position and constraint force changing.(Point A represents the optimal f_{nd} and y_{d3} in the case of the minimum consumption energy)

the function of y_{d3} and f_{nd} . Assuming that the value of f_{nd} is a constant, consumption energy is changing based on y_{d3} . Furthermore, the function between-consumption energy and y_{d3} is parabolic form which has a minimum value. Likewise, if y_{d3} is constant value, the function between consumption energy and f_{nd} is parabolic form, too. Therefore, it is necessary to calculate the optimal pair for y_{d3} and f_{nd} to obtain the minimum consumption energy. As shown in Fig.8, at point A which means that $f_{nd} = 35[N]$ and $y_{d3} = 0.55[m]$, the consumption energy for the 5-link elbow-bracing manipulator is minimum.

5 Conclusion

In this paper, first, the constraint dynamics of the elbow-bracing manipulator including motor was proposed.

Next, by dividing the work space into two orthogo-

nal domain, a position domain and a force domain, a controller whose control of constraint force and position has no interference was discussed.

Then, the consumption energy and tracking error for the 5-link manipulator with constraint and without constraint were analysed. And the simulation results reveal that the model of 5-link elbow-bracing manipulator proposed in this paper is effectiveness in the aspect of energy-efficiency and high accuracy during the process of tracking spatial trajectory.

Finally, the relationship between elbow-bracing position, constraint force and consumption energy is analysed. What's more, Based on Fig.8, it is known that the minimum consumption energy for the manipulator can be obtained at optimal values for elbow-bracing position and constraint force pair. And, in our further research, we focus on the method to obtain these values, as well as to achieve tracking rapid trajectory.

References

- 1) J. Roy, L. L. Whitcomb, "Adaptive Force Control of Position/Velocity Controlled Robots" *Theory and Experiment, IEEE Transactions on Robotics and Automation*, Vol.18, No.2, pp.121-137, 2002.
- 2) B. Siciliano, L. Villani, "A passivity-based approach to force regulation and motion control of robot manipulators" *Automatica*, Vol.32, No.3, pp.443-447, 1996.
- 3) L. Villani, C. C. de Wit, B. Brogliato, "An exponentially stable adaptive control for force and position tracking of robot manipulators" *IEEE Trans. Automat. Contr.*, Vol.44, pp.778-802, 1999.
- 4) J. D. Schutter, H. V. Brussel, "Compliant robot motion 2. A control approach based on external control loops" *Int. J. Robot. Res.*, Vol.7, No.4, pp.18-33, 1988.
- 5) J. Park, O. Khatib, "Multi-Link Multi-Contact Force Control for Manipulators" *Proc. of 2005 IEEE Int. Conf. on Robotics and Automation*, pp.3624-3629, 2005.
- 6) A. Petrovskaya, J. Park, O. Khatib, "Probabilistic Estimation of Whole Body Contacts for Multi-Contact Robot Control" *Proc. of IEEE International Conference on Robotics and Automation*, pp.568-573, 2007.
- 7) T. Yoshikawa, "Dynamic Hybrid Position/Force control of Robot Manipulators—Description of Hand Constraints and Calculation of Joint Driving Force" *IEEE J. on Robotics and Automation*, Vol.RA-3, No.5, pp.386-392, 1987.
- 8) K. Yamane, Y. Nakamura, "Forward Dynamics Computation of Open Kinematic Chains Based on the Principle of Virtual Work" *Proc. of IEEE Int. Conf. on Robotics and Automation*, pp.2824-2831, 2001.
- 9) K. Yamane, Y. Nakamura, "Dynamics Filter - Concept and Implementation of On-Line Motion Generator for Human Figures" *IEEE Transactions on Robotics and Automation*, vol.19, no.3, pp.421-432, 2003.
- 10) H. West, H. Asada, "A Method for the Design of Hybrid Position/Force Controllers for Manipulators Constrained by Contact with the Environment" *Proc. of IEEE Int. Conf. on Robotics and Automation*, pp.251-260, 1985.
- 11) H. Hemami, B. F. Wyman, "Modeling and Control of Constrained Dynamic Systems with Application to Biped Locomotion in the Frontal Plane" *IEEE Trans. on Automatic Control*, Vol.AC-24, No.4, pp.526-535, 1979.
- 12) Z. X. Peng, N. Adachi, "Position and Force Control of Manipulators without Using Force Sensors" (in Japanese) *Trans. of the Japan Society of Mechanical Engineers(C)*, Vol.57, pp.1625-1630, 1991.
- 13) M. Minami, K. Adachi, S. Sasaki, A. Yanou, "Improvement of Accuracy to Grind by Changing Position Control Gain for Shape-grinding" *Applied Mechanics and Materials*, Vol. 555, pp.186-191, 2014 .
- 14) Y. Washino, M. Minami, H. Kataoka, T. Matsuno, A. Yanou, M. Itoshima, Y. Kobayashi, "Hand- Trajectory Tracking Control with Bracing Utilization of Mobile Redundant Manipulator" *SICE Annual Conference*, pp.219-224, 2012.
- 15) D. Kondo, M. Itosima, M. Minami, A. Yano, "Proposal of Bracing Controller Utilizing Constraint Redundancy and Optimization of Bracing Position" *Proceedings of SICE Annual Conference 2013*, pp.2732-2737, 2013.
- 16) Xiang Li, Hiroki Imanishi, Mamoru Minami, Takayuki Matsuno and Akira Yanou, "Dynamical Modeling of Humanoid with Nonlinear Floor Friction", 21st International Symposium on Artificial Life and Robotics, B-Con Plaza Beppu, January 20-22, 2016
- 17) D. Kondo, X. Li, A. Yanou, M. Minami, "Energy-efficient and precise trajectory-tracking with bracing manipulator", *The 20th International Symposium on Artificial Life and Robotics*, OS2-7, pp.563-568, 2015.

複素特異階段追跡法の解品質と計算時間の実験評価

○佐藤聖也 (産業技術総合研究所) 中野良平 (中部大学)

Solution Quality and Processing Time of Complex-valued Singularity Stairs Following

*S. Satoh (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST)
and R. Nakano (Chubu University)

Abstract— A complex-valued multilayer perceptron (C-MLP) has the potential for such applications as signal processing, control, and prediction since it directly copes with complex numbers. Recently, complex-valued singularity stairs following (C-SSF) has been developed as a new learning algorithm for C-MLP. C-SSF makes good use of singular regions to stably find excellent solutions of successive models. The performance of C-SSF is evaluated relative to C-BP and C-BFGS in our experiments using various datasets.

Key Words: Complex-valued neural networks, Complex-valued multilayer perceptron, Singular region, Reducibility mapping, Learning method

1 まえがき

複素多層パーセプトロン (複素 MLP) は複素ニューラルネットワーク (複素 NN) の 1 種であるが, 複素数を自然に扱えるため, 電波や音波など, 複素数の形で自然に表現される信号の処理において高い性能が期待できる²⁾.

複素 MLP の探索法としては, 探索空間の勾配を利用した複素バックプロパゲーション (複素 BP)^{7, 8)} や, 勾配と Hesse 行列の逆行列の近似を用いた複素 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (C-BFGS)^{12, 11)} などがある. C-BFGS は探索空間の曲率まで考慮して探索するため, 複素 BP よりも高い性能を示している. しかし, 複素 MLP の探索空間には, 実 MLP と同様, 最適解や, 勾配がゼロの連続領域である特異領域が多数存在するため, C-BFGS を用いたとしても初期値によっては良質の解が得られない.

隠れユニットが J 個の複素 MLP の特異領域は隠れユニットが $J-1$ 個の解に可約性写像を適用すると形成され, その特異領域上のほとんどの点はそこから降下するルートが存在する⁹⁾. この性質を利用し, 探索が停滞する特異領域を逆に利用する方法として, 複素特異階段追跡 (C-SSF: Complex-valued Singularity Stairs Following) 1.3 が提案された¹⁵⁾. C-SSF1.3 では複素 MLP ($J-1$) の最良解に可約性写像を適用して形成した特異領域から探索するため, 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いる. そのため安定して良質の解を得ることが期待できる. また, C-SSF1.3 は探索枝刈り手法と探索本数に上限を設定する手法により高速に処理できる. そのため, 文献¹⁵⁾ の, 2 種の人工データを用いた計算機実験では, 初期値をランダムに選択して探索する従来法よりも高速に, 従来法より良質の解が得られた.

本稿では複素 NN のベンチマークとして用いられる合計 6 種のデータを用いて C-SSF1.3 を評価する. 複素 MLP の活性化関数として, シグモイド関数に複素数をそのまま入力する関数を用いて計算機実験を行った結果, 全ての実験において, C-SSF1.3 は, 従来法よりも早く処理が終了し, かつ, 従来法よりも良質の解が得られた.

2 複素多層パーセプトロン

2.1 目的関数

入力ベクトル \mathbf{x} が与えられたときの, 隠れユニットが J 個の複素 MLP (複素 MLP (J)) の出力は以下である. ただし, g は活性化関数, 重みは $\boldsymbol{\theta}^{(J)} = \{w_0^{(J)}, w_j^{(J)}, \mathbf{w}_j^{(J)}, j = 1, \dots, J\}$ とし, 重みや \mathbf{x} の要素は全て複素数とする.

$$f_J(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}^{(J)}) = w_0^{(J)} + \sum_{j=1}^J w_j^{(J)} z_j, \quad (1)$$

$$z_j \equiv g(\mathbf{w}_j^{(J)\top} \mathbf{x}) \quad (2)$$

本稿では, 活性化関数として複素数をそのままシグモイド関数に入力する以下の関数を用いる^{4, 5)}. ただし, $c = a + ib$, $i = \sqrt{-1}$ とする.

$$\begin{aligned} \sigma(c) &= \frac{1}{1 + e^{-c}} \\ &= \frac{1 + e^{-a} \cos b + ie^{-a} \sin b}{1 + 2e^{-a} \cos b + e^{-2a}} \end{aligned} \quad (3)$$

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.

目的関数としては以下の 2 乗和誤差を用いる. ただし, 訓練データは $\{\mathbf{x}^\mu, y^\mu, \mu = 1, \dots, N\}$ とし, $\bar{\delta}^\mu$ は δ^μ の共役複素数とする.

$$E_J = \sum_{\mu=1}^N \delta_J^\mu \bar{\delta}_J^\mu, \quad \delta_J^\mu \equiv f_J(\mathbf{x}^\mu; \boldsymbol{\theta}^{(J)}) - y^\mu \quad (4)$$

2.2 探索法

複素 MLP の探索法としては複素バックプロパゲーション (複素 BP)^{7, 8)} や複素 Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (C-BFGS)^{12, 11)} がある. 複素 BP は勾配 (の逆方向) を探索方向とする方法である. 文献⁷⁾ では, 学習率を固定とし, 活性化関数は, 複素数を実部と虚部に分けてそれぞれをシグモイド関数に入力する関数を用いていたが, 本稿では極を含む式 (3) の

活性化関数を利用する。活性化関数の極は直線探索を行うことにより回避できるので、本稿では直線探索付きのバッチ複素 BP を用いる。この方法を以下では単に C-BP と呼ぶ。本稿で用いる直線探索はバックトラッキング法¹⁰⁾とした。

C-BFGS は探索空間の勾配のみでなく曲率も考慮するため、C-BP よりも効率的に探索空間を降下できる^{12, 11)}。しかし、探索空間には局所解や以下で説明する特異領域が存在するため、初期値によっては C-BFGS を用いても良質の解が得られないことがある。

2.3 特異領域

複素 MLP(J) の特異領域は複素 MLP($J-1$) の解に可約性写像を適用して形成された領域の中に存在する⁹⁾。ここでは可約性写像 α, β, γ の 3 種類を考え、複素 MLP($J-1$) の解にそれぞれを適用した領域 $\hat{\Theta}_\alpha^{(J)}, \hat{\Theta}_\beta^{(J)}, \hat{\Theta}_\gamma^{(J)}$ を以下とする。ただし、複素 MLP($J-1$) の解を $\{\hat{w}_0^{(J-1)}, \hat{w}_j^{(J-1)}, \hat{\mathbf{w}}_j^{(J-1)}, j=1, \dots, J-1\}$ とする。

$$\hat{\Theta}_\alpha^{(J)} \equiv \left\{ \boldsymbol{\theta}^{(J)} \mid w_0^{(J)} = \hat{w}_0^{(J-1)}, w_1^{(J)} = 0, \right. \\ \left. w_j^{(J)} = \hat{w}_{j-1}^{(J-1)}, \mathbf{w}_j^{(J)} = \hat{\mathbf{w}}_{j-1}^{(J-1)}, \right. \\ \left. j=2, \dots, J \right\} \quad (5)$$

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

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

上記の領域の内、以下の 2 つの領域は特異領域である。

1. $\hat{\Theta}_\alpha^{(J)}$ と $\hat{\Theta}_\beta^{(J)}$ が重なる以下の領域 $\hat{\Theta}_{\alpha\beta}^{(J)}$ は特異領域である。

$$\hat{\Theta}_{\alpha\beta}^{(J)} \equiv \left\{ \boldsymbol{\theta}^{(J)} \mid w_0^{(J)} = \hat{w}_0^{(J-1)}, w_1^{(J)} = 0, \right. \\ \left. \mathbf{w}_1^{(J)} = (w_{10}^{(J)}, 0, \dots, 0)^T, \right. \\ \left. w_j^{(J)} = \hat{w}_{j-1}^{(J-1)}, \mathbf{w}_j^{(J)} = \hat{\mathbf{w}}_{j-1}^{(J-1)}, \right. \\ \left. j=2, \dots, J \right\} \quad (8)$$

2. 領域 $\hat{\Theta}_J^\gamma$ は、以下の式を満たす特異領域である。ただし、 $m=2, \dots, J$ とする。

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

上式は媒介変数 q を用いて以下と表せる。

$$w_1^{(J)} = q \hat{w}_{m-1}^{(J-1)}, w_m^{(J)} = (1-q) \hat{w}_{m-1}^{(J-1)} \quad (10)$$

3 複素特異階段追跡法 1.3

特異領域は勾配がゼロであるため探索が停滞するが、C-SSF では特異領域を逆に利用して探索する^{13, 14, 15)}。複素 MLP(J) の探索で利用する特異領域は複素 MLP($J-1$) の最良解に可約性写像を適用して形成するため、その特異領域上の誤差 E_J は複素 MLP($J-1$) の最良解の誤差 E_{J-1} と等しい。C-SSF ではその特異領域から探索するため、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る。以下では C-SSF1.3¹⁵⁾ について簡単に説明する。利用する特異領域などの設定は全て文献¹⁵⁾と同じとした。

3.1 特異領域からの探索

勾配を利用した C-BP や C-BFGS では特異領域から探索を開始できない。そのため C-SSF1.3 では特異領域上の Hesse 行列の固有値と固有ベクトルを利用する。Hesse 行列の負の固有値に対応する固有ベクトル方向は特異領域から降下する方向であるため、その方向に重みを更新することで特異領域から降下する。以下の計算機実験では固有ベクトル方向に重みを 1 回更新した後の探索は C-BFGS を用い、後述する従来法と同様、重み更新回数の上限は 10,000 回とした。

3.2 複素特異階段追跡法 1.3 の処理の流れ

以下に C-SSF1.3 の処理の流れを示す。ただし、隠れユニットの最大数を J_{\max} とする。

C-SSF1.3 の処理の流れ

- 1: 複素 MLP($J=0$) の大域最適解を求める。
 $(\hat{w}_0^{(0)} \leftarrow (1/N) \sum_{\mu=1}^N y^\mu)$
- 2: **for** $J=1, \dots, J_{\max}$ **do**
- 3: 複素 MLP($J-1$) の最良解に可約性写像を適用し、重みを特異領域上に設定する。
- 4: 特異領域上の重みの Hesse 行列の負の固有値に対応する固有ベクトルを求める。
- 5: Step 4 で計算した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 for**

以下の計算機実験では、Step 3 で設定する特異領域 $\hat{\Theta}_{\alpha\beta}^{(J)}, \hat{\Theta}_\gamma^{(J)}$ 上の点は以下とした。

- $\hat{\Theta}_{\alpha\beta}^{(J)}$: 式 (8) の $w_{10}^{(J)}$ を $-1, 0, 1$ とした 3 点
- $\hat{\Theta}_\gamma^{(J)}$: 式 (10) の q を $0.5, 1.0, 1.5$ (それぞれ内分, $w_m^{(J)} = 0$, 外分の点) とした $3 \times (J-1)$ 点

3.3 高速化手法

上述したように、利用する特異領域 $\hat{\Theta}_J^\gamma$ は隠れユニット数の増加に伴って増加する。また、隠れユニット数の増加に伴って探索空間の次元数も増えるため、全ての降下する方向に探索を行うと、隠れユニット数の増加に伴って処理時間が増大する傾向がある¹³⁾。そのため C-SSF1.3 では探索枝刈り手法と探索本数に上限を設定する手法を用いることにより高速化する。

探索枝刈りは、現在の探索が以前の探索と合流した場合は探索を中止する方法である。詳細は文献¹⁴⁾を参照されたい。

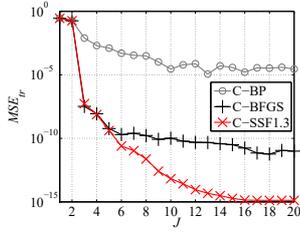


Fig. 1: Training error for synthetic problem 1.

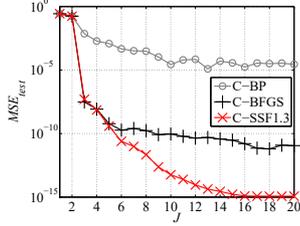


Fig. 2: Test error for synthetic problem 1.

探索本数の上限を設定する手法では、上限を 100 とした。探索の順序は特異領域上の Hesse 行列の固有値が小さい順とする。固有値が小さい順とする理由は、特異領域上の探索空間を 2 次近似し、固有値が小さい固有ベクトル方向を見ると、固有値が大きい方向よりも急降下しているためである。そのため、固有値が小さい方向の方が大きい方向よりも良質の解が得られることが期待できる。

4 計算機実験

C-SSF1.3 の性能を評価するため、6 種のデータを用いて実験を行った。これらのデータは様々な文献で用いられている^{16, 3, 6, 1}。本稿ではデータの正規化は行わずに実験を行った。

比較する従来法は、C-BP と C-BFGS とし、各隠れユニット数 J で 100 回試行した。各試行において、重みの実部と虚部の初期値を区間 $(-1, 1)$ の中からランダムに選択し、重みの更新回数の上限は 10,000 回とした。

訓練誤差とテスト誤差は以下の平均 2 乗誤差 (MSE) により計算した。

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

4.1 人工問題 1

人工問題 1 としては以下の式を用いた¹⁶。

$$f(z_1, z_2) = \frac{1}{6}(z_1^2 + z_2^2) \quad (12)$$

z_1 と z_2 は複素数とし、 $|z_1| \leq 2.5$, $|z_2| \leq 2.5$ を満たす範囲でランダムに生成した。訓練データとテストデータのサンプル数はそれぞれ 3,000, 1,000 とした。隠れユニットの最大数は 20 とした。

Fig. 1, 2 に各 J での最小訓練誤差とそのときのテスト誤差を示す。C-BP では、 $J = 2$ 以降 C-BFGS や C-SSF1.3 よりも訓練誤差とテスト誤差が大きく、隠れユニットの増加に伴って訓練誤差が減少しなかった。C-BFGS では C-BP よりも大幅に良質の解が得られたが、 $J = 19$ 以降では訓練誤差が単調減少しなかった。

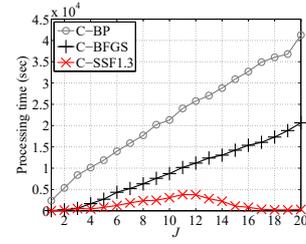


Fig. 3: Processing time for synthetic problem 1.

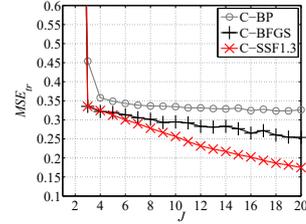


Fig. 4: Training error for synthetic problem 2.

一方、C-SSF1.3 では訓練誤差が単調減少し、最も良質の解が得られた。

Fig. 3 に各 J での処理時間を示す。C-BP, C-BFGS, C-SSF1.3 の合計処理時間はそれぞれ 123:43, 51:49, 7:51(時間:分) となり、C-SSF1.3 が最も早く終了した。各探索法の各 J での探索本数は全て 100 としたが、C-BP が最も時間がかかった。これは、C-BP では条件数が大きい探索空間では直線探索に時間がかかる傾向があるためと考えられる。

4.2 人工問題 2

人工問題 2 としては以下の式を用いた¹⁶。

$$f(z_1, z_2, z_3, z_4) = \frac{1}{1.5} \left(z_3 + 10z_1z_4 + \frac{z_2^2}{z_1} \right) \quad (13)$$

z_1, z_2, z_3, z_4 は複素数とし、以下を満たす範囲でランダムに生成した。

$$0.1 \leq |z_1| \leq 1, \quad |z_k| \leq 1, \quad k = 2, 3, 4 \quad (14)$$

訓練データとテストデータのサンプル数はそれぞれ 3,000, 1,000 とし、隠れユニットの最大数は 20 とした。

Fig. 4, 5, 6 に各 J での最小訓練誤差とそのときのテスト誤差、処理時間を示す。人工問題 1 と同様、C-BP の誤差は最も大きく、C-SSF1.3 では C-BFGS よりも良質の解が得られた。C-BP, C-BFGS, C-SSF1.3 の合計処理時間はそれぞれ 110:36, 18:27, 5:00(時間:分) となり、処理時間も人工問題 1 と同様、C-SSF1.3 が最も早く終了した。

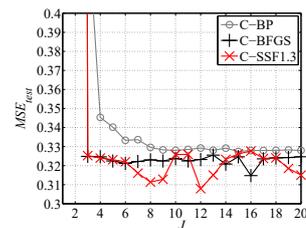


Fig. 5: Test error for synthetic problem 2.

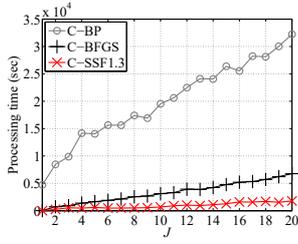


Fig. 6: Processing time for synthetic problem 2.

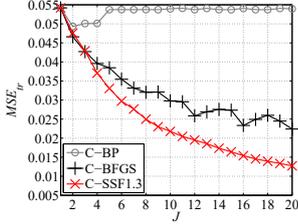


Fig. 7: Training error for synthetic problem 3.

4.3 人工問題 3

人工問題 3 としては以下の式を用いた³⁾.

$$f(z) = e^{i\text{Im}(z)}(1 - \text{Re}(z)^2 - \text{Im}(z)^2) \quad (15)$$

z は複素数とし, $|z| \leq 1$ を満たす範囲でランダムに生成した. 訓練データとテストデータのサンプル数はそれぞれ 3,000, 1,000 とし, 隠れユニットの最大数は 20 とした.

Fig. 7, 8, 9 に各 J での最小訓練誤差とそのときのテスト誤差, 処理時間を示す. このデータでも C-BP の誤差は最も大きく, C-SSF1.3 では C-BFGS よりも良質の解が得られた. C-BP, C-BFGS, C-SSF1.3 の合計処理時間はそれぞれ 81:41, 30:12, 02:13(時間:分)となり, C-SSF1.3 が最も早く終了した.

4.4 非線形チャネル等化

チャネル等化の問題は複素 MLP の重要な応用例の 1 つと思われる. 変調方式の 1 つの QAM(quadrature amplitude modulation) の信号は複素数の形で自然に表現できる. チャネル等化器の目的はあるチャネルを通過した信号を受信し, その元の信号を推定することである. チャネル等化の問題として, 以下の非線形のチャネルを用いた¹⁶⁾. ただし, チャネルの入力は $s(k) = \{\pm 1 \pm i\}$, 出力は $o^*(k)$ とする.

$$z(k) = (0.34 - 0.27i)s(k) + (0.87 + 0.43i)s(k-1) + (0.34 - 0.21i)s(k-2) \quad (16)$$

$$o^*(k) = z(k) + 0.1z(k)^2 + 0.05z(k)^3 \quad (17)$$

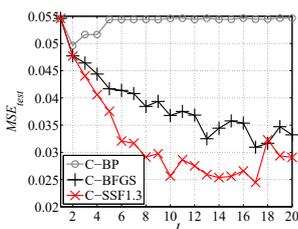


Fig. 8: Test error for synthetic problem 3.

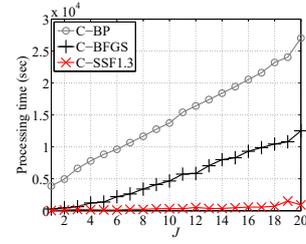


Fig. 9: Processing time for synthetic problem 3.

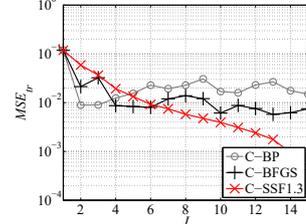


Fig. 10: Training error for nonlinear channel equalization.

$$o(k) = o^*(k) + n_R(k) + in_I(k) \quad (18)$$

$n_R(k), n_I(k)$ は, 以下の SNR が, 訓練データでは 15 dB, テストデータでは 10 dB となるように決定した.

$$SNR = 10 \log_{10} \left(\frac{\sum_{k=1}^N |o^*(k)|^2}{\sum_{k=1}^N |n(k)|^2} \right) \quad (19)$$

複素 MLP への入力信号は $o(k), o(k+1), o(k+2)$ の 3 入力とし, 教師信号は $s(k)$ とした. 訓練データとテストデータのサンプル数はそれぞれ 5,000, 10,000 とし, 隠れユニットの最大数は 15 とした.

Fig. 10, 11 に各 J での最小訓練誤差とそのときのテスト誤差を示す. C-SSF1.3 の訓練誤差は J が 6 以下では最小でなかったが, J の増加に伴って単調減少し, $J = 7$ 以降では C-BP や C-BFGS よりも小さくなった. また, C-SSF1.3 のテスト誤差は $J = 12$ のとき最小となり, 最良の解が得られた.

Fig. 12 に各 J での処理時間を示す. C-BP, C-BFGS, C-SSF1.3 の合計処理時間はそれぞれ 98:48, 5:39, 2:14(時間:分)となった.

4.5 線形時系列予測

時系列予測の問題も複素 MLP の重要な応用例の 1 つと思われる. 線形の時系列を予測する問題として, 以下の式から生成したデータを用いた⁶⁾.

$$y(k) = 1.79y(k-1) - 1.85y(k-2) + 1.27y(k-3) - 0.41y(k-4) + n_R(k) + in_I(k) \quad (20)$$

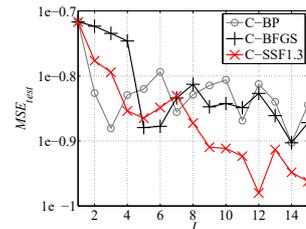


Fig. 11: Test error for nonlinear channel equalization.

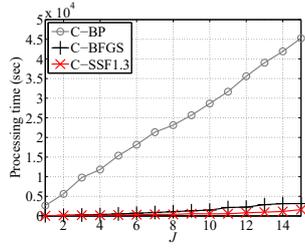


Fig. 12: Processing time for nonlinear channel equalization.

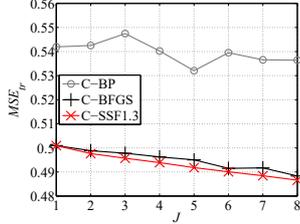


Fig. 13: Training error for linear time series prediction.

ただし n_R, n_I は $\mathcal{N}(0, 1/2)$ に従う正規乱数とした. 複素 MLP への入力信号は $y(k-4), y(k-3), y(k-2), y(k-1)$ の 4 入力とし, 教師信号は $y(k)$ とした. 訓練データとテストデータのサンプル数はそれぞれ 5,000, 10,000 とし, 隠れユニットの最大数は 8 とした.

Fig. 13, 14 に各 J での最小訓練誤差とそのときのテスト誤差を示す. C-BP の誤差は C-BFGS や C-SSF1.3 よりも大きいことがわかる. テスト誤差は C-SSF1.3 のとき最小となった. このときの隠れユニット数は 1 であったが, これはこのデータの非線形性がそれほど強くないためと考えられる.

Fig. 15 に各 J での処理時間を示す. C-BP, C-BFGS, C-SSF1.3 の合計処理時間はそれぞれ 36:10, 1:04, 0:24 (時間:分) となり, このデータでも C-SSF1.3 が最も早く終了した.

4.6 非線形時系列予測

非線形の時系列を予測する問題としては, 以下の式から生成したデータを用いた¹⁾.

$$y(k) = 1.79y(k-1) - 1.85y(k-2) + 1.27y(k-3) - 0.41y(k-4) + n_R(k) + in_I(k) \quad (21)$$

$$z(k) = \frac{z(k-1)}{1 + z^2(k-1)} + y^3(k) \quad (22)$$

ただし n_R, n_I は $\mathcal{N}(0, 1/2)$ に従う正規乱数とした. 4.5 のデータとの違いは式 (22) のみである. 複素 MLP へ

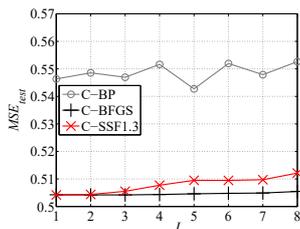


Fig. 14: Test error for linear time series prediction.

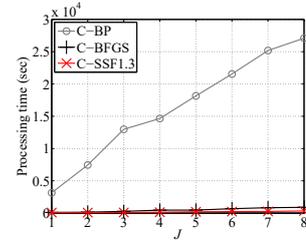


Fig. 15: Processing time for linear time series prediction.

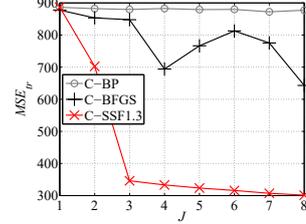


Fig. 16: Training error for nonlinear time series prediction.

の入力信号は $y(k-4), y(k-3), y(k-2), y(k-1)$ の 4 入力とし, 教師信号は $z(k)$ とした. 訓練データとテストデータのサンプル数はそれぞれ 5,000, 10,000 とし, 隠れユニットの最大数は 8 とした.

Fig. 16, 17, 18 に各 J での最小訓練誤差とそのときのテスト誤差, 処理時間を示す. C-BP の誤差は最も大きく, C-SSF1.3 では他の探索法よりも良質の解が得られた. C-BP, C-BFGS, C-SSF1.3 の合計処理時間はそれぞれ 72:28, 0:54, 0:52 (時間:分) となり, C-SSF1.3 が最も早く終了した.

4.7 実験全体のまとめ

Table 1, 2 に 4.1 ~ 4.6 の各探索法により得られた訓練データの最小 MSE とテストデータの最小 MSE を示す. 太字は最良値を示す. 全ての実験において C-SSF1.3 の訓練誤差が最小となった. また, テスト誤差も C-SSF1.3 により得られた解が最小であった. 4.5 では C-BFGS と C-SSF1.3 のテスト誤差はほとんど同じであったが, これは 4.5 のデータの非線形性があまり強くないため, テスト誤差に差が出なかったためと思われる.

また, Table 3, 4 に 4.1 ~ 4.6 の各探索法により得られた, 隠れユニット数が J_{\max} のときの訓練データの MSE ($MSE_{J_{\max}}$) の平均と標準偏差を示す. Table に示すように, C-SSF1.3 の $MSE_{J_{\max}}$ の平均は全ての実験において最小であった. また, 標準偏差も 4.3 以外では他の探索法よりも大幅に小さいことがわかる. こ

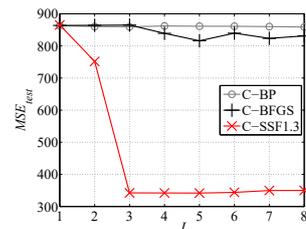


Fig. 17: Test error for nonlinear time series prediction.

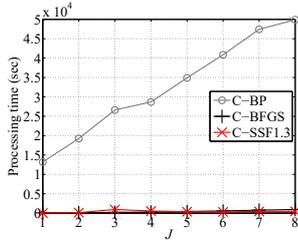


Fig. 18: Processing time for nonlinear time series prediction.

Table 1: Minimum MSE of training data.

データ (節番号)	C-BP	C-BFGS	C-SSF
4.1	1.16e-05	5.78e-12	1.31e-15
4.2	0.323	0.254	0.175
4.3	0.0493	0.0224	0.0127
4.4	0.0089	0.00575	0.000482
4.5	0.532	0.488	0.487
4.6	872	643	301

これは、C-SSF1.3では隠れユニットが1つ少ないときの最良解を利用するため、その解よりも訓練誤差が増加することはなく、安定して探索空間を降下できることが原因と考えられる。

Table 5に4.1～4.6の各探索法の処理時間を示す。C-SSF1.3の探索本数の上限はC-BPやC-BFGSの探索本数と同様100としたが、全ての実験においてC-SSF1.3が最も早く処理が終了した。

5 むすび

本稿では複素NNのベンチマークとしてよく用いられる合計6種のデータを用いてC-SSF1.3の性能を評価した。全ての実験において、C-SSF1.3の訓練誤差とテスト誤差が最小となり、処理時間に関してもC-SSF1.3が最も早く処理が終了した。

今後の課題として、C-SSF1.3に正則化手法などを導入して実験することなどが考えられる。

謝辞

本研究はJSPS科研費25330294の助成を受けて行った。

参考文献

- 1) S.L. Goh, and D.P. Mandic: Nonlinear adaptive prediction of complex-valued signals by complex-valued PRNN, *IEEE Transactions on Signal Processing*, **53**(5), 1827/1836 (2005)
- 2) A. Hirose: *Complex-valued neural networks*, 2nd ed., Springer-Verlag, Berlin (2012)

Table 2: Minimum MSE of test data.

データ (節番号)	C-BP	C-BFGS	C-SSF
4.1	1.25e-05	6.24e-12	1.17e-15
4.2	0.327	0.315	0.308
4.3	0.0496	0.0309	0.0245
4.4	0.125	0.125	0.105
4.5	0.543	0.504	0.504
4.6	859	816	342

Table 3: Means of $MSE_{J_{\max}}$ of training data.

データ (節番号)	C-BP	C-BFGS	C-SSF
4.1	0.00284	8.87e-10	1.31e-15
4.2	0.339	0.281	0.18
4.3	0.0541	0.0314	0.0131
4.4	0.0596	0.0264	0.000807
4.5	2.03	1.69	0.488
4.6	890	826	305

Table 4: Standard deviations of $MSE_{J_{\max}}$ of training data.

データ (節番号)	C-BP	C-BFGS	C-SSF
4.1	0.0193	2.19e-09	4.05e-21
4.2	0.0102	0.0106	0.00149
4.3	2.73e-05	0.00385	0.000139
4.4	0.0617	0.0113	0.000115
4.5	0.409	0.705	0.000329
4.6	4.53	25.3	1.35

- 3) G.-B. Huang, M.-B. Li, L. Chen, and C.-K. Siew: Incremental extreme learning machine with fully complex hidden nodes, *Neurocomputing*, **71**, 576/583 (2008)
- 4) M.S. Kim, and C.C. Guest: Modification of back-propagation networks for complex-valued signal processing in frequency domain, *Proc. International Joint Conf. on Neural Networks*, **3**, 27/31 (1990)
- 5) H. Leung, and S. Haykin: The complex backpropagation algorithm, *IEEE Transactions on Signal Processing*, **39**(9), 2101/2104 (1991)
- 6) D. Mandic, and J. Chambers: *Recurrent Neural Networks for Prediction: Learning Algorithms, Architectures and Stability*, John Wiley & Sons, Ltd., Chichester (2001)
- 7) 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)
- 8) T. Nitta, and M. Tanaka: Current status of research on neural networks with high-dimensional parameters, *Circulars of the Electrotechnical Laboratory* (1999)
- 9) T. Nitta: Local minima in hierarchical structures of complex-valued neural networks, *Neural Networks*, **43**, 1/7 (2013)

Table 5: Total processing time.

データ (節番号)	C-BP	C-BFGS	C-SSF
4.1	123:43	51:49	07:51
4.2	110:36	18:27	05:00
4.3	81:41	30:12	02:13
4.4	98:48	05:39	02:14
4.5	36:10	01:04	00:24
4.6	72:28	00:54	00:52

- 10) J. Nocedal, and S. Wright: Numerical optimization, 2nd ed., Springer-Verlag, New York (2006)
- 11) C.A. Popa: Quasi-Newton learning methods for complex-valued neural networks, Proc. International Joint Conf. on Neural Networks (2015)
- 12) 鈴村真矢, 中野良平: 複素 BFGS 法を用いた複素ニューラルネットワークの学習法, 信学論 (D), **J96-D**(3), 423/431 (2013)
- 13) S. Satoh, and R. Nakano: Complex-valued multilayer perceptron search utilizing singular regions of complex-valued parameter space, Proc. 24th International Conf. on Artificial Neural Networks, 315/322 (2014)
- 14) S. Satoh, and R. Nakano: Complex-valued multilayer perceptron learning using singular regions and search pruning, Proc. International Joint Conf. on Neural Networks (2015)
- 15) S. Satoh, and R. Nakano: A yet faster version of complex-valued multilayer perceptron learning using singular regions and search pruning, Proc. 7th International Conf. on Neural Computation Theory and Applications, 122/129 (2015)
- 16) R. Savitha, S. Suresh, N. Sundararajan, and P. Saratchandran: A new learning algorithm with logarithmic performance index for complex-valued neural networks, Neurocomputing, **72**, 3771/3781 (2009)

深層複素ニューラルネットワークの学習特性

○新田 徹 (産業技術総合研究所)

*T. Nitta (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST)

Abstract - In this paper, we prove that some of singular points in deep complex-valued neural networks have been resolved as an inherent property. Such deep neural networks do not get stuck in local minima or plateaus caused by the critical points comparatively. Next, we make some experiments on the two spirals problem, which support our theory.

Key Words: Complex-valued neural network, Deep learning, Singular point, Learning algorithm

1 はじめに

一般に、深い層を持つニューラルネットワーク(深層ニューラルネットワーク)(以下、ニューラルネットワークをNNと書く)は、3層NNのような浅い層を持つNNに比べて学習が困難である¹⁻⁴。Hintonらは、一つの層毎に学習を行うような学習アルゴリズムとともに深層信念ネットワーク(Deep Belief Network)を提案した⁵。教師無し学習アルゴリズムを用いる事前学習(pre-training)を行うことにより汎化能力を向上させた。それ以降、深層NNの研究が盛んに行われている。

一方、特異点は、NNのような学習モデルの学習ダイナミクスに悪い影響を与え、学習停滞状態をもたらすことがわかっている⁶⁻⁸。当然ながら、特異点は深層NNの学習にも悪い影響を与える。 $\partial E(\omega_*)/\partial \omega = \mathbf{0}$ を満たす点 ω_* はNNの誤差関数 E の危点と呼ばれる。危点はローカルミニマム、ローカルマキシマム、鞍点のいずれかになる。福水らは、 $H-1$ 個の中間ニューロンを持つ3層NNにおける危点は、 H 個の中間ニューロンを持つ3層NNの危点になり得る、そして、条件に応じてローカルミニマムあるいは鞍点になることを証明した⁹。この種の危点はNNの特異点であり、学習停滞の原因となり得る。

本稿では、深層複素NN¹⁰⁻¹²の学習特性を調べる。一般に、深層複素NNは、それと等価な深層実NN(複素型深層実NNと呼ぶ)に分解することができる¹³。ただし、複素型深層実NNの重みには制約が存在する。ここで、実数値信号を扱う通常のNNを実NNと呼んでいる。なお、本稿では、単にNNと書く時、実NNを意味するものとする。まず、複素型深層実NNは通常の深層実NNと比べて、ネットワー

ク構造として特異点が少ないことを示す。そのことから、複素型深層実NN、すなわち、深層複素NNはローカルミニマムやプラトーに陥ることが比較的少ないと考えられる。次に、深層複素NNの学習特性を実験的に調べるために、極端な非線形性を持つTwo spirals問題を解かせる。この問題は、数個の中間層を持つ通常の深層実NNで、標準的な誤差逆伝播学習アルゴリズム(back-propagation learning algorithm, 以下、BPと書く)を使った場合、解けなかったと報告されている¹⁴。それに対して、深層複素NNの場合、標準的な複素誤差逆伝播学習アルゴリズム(以下、複素BP)¹⁰を使って、4層ネットワーク(中間層は2つ)で解けることが分かった。

2 深層実NNモデル

本章では、本稿で対象とする $(N+2)$ 層実NNモデルについて述べる。

L 個の入力ニューロン、 N 個の中間層、1個の出力ニューロンから成る深層NNを考える。任意の中間層の中間ニューロン j への入力 X_j は $X_j = \sum_{i=1} w_{ji} y_i + \nu_j$ と定義される。ここで、 w_{ji} はニューロン j と1つ前の中間層のニューロン i との間の重み、 y_i は1つ前の中間層のニューロン i からの出力信号、 ν_j は中間ニューロン j の閾値をそれぞれ表す。中間ニューロン j の出力信号は $y_j = \varphi(X_j)$ で与えられる。ここで、 $\varphi: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ は微分可能な活性化関数、 \mathbf{R} は実数全体の集合である。

$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta})$ を深層NNの出力値とする。ここで、 $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^L$ は深層NNへの入力ベクトル、 $\boldsymbol{\theta}$ は深層NNのすべてのパラメータをまとめたベクトルである。出力ニューロンの活性化関数は、 $\psi: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}, x \mapsto x$ とする。

K 組の学習パターン $\{(\mathbf{x}^{(m)}, y^{(m)}) \in \mathbf{R}^L \times \mathbf{R} \mid m = 1, \dots, K\}$ が与えられた時、それらによって表現される関係を実現するために深層 NN を用いるものとする。学習の目的は、誤差関数 $E(\boldsymbol{\theta}) = \sum_{m=1}^K l(y^{(m)}, f(\mathbf{x}^{(m)}; \boldsymbol{\theta})) \in \mathbf{R}$ を最小化するパラメータを見つけることである。ここで、損失関数 $l(y, z) : \mathbf{R} \times \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ は $l(y, z) \geq 0$ を満たし、等号が成り立つのは $y = z$ の時であり、かつ、その時に限る。

ここで、ある特定の間層 k を固定し、中間層 k に M 個の中間ニューロンを持つ深層 NN を " M 深層 NN" と呼ぶことにする (簡単のために、 k は明示しない)。そして、 $f^{(M)}(\mathbf{x}; \boldsymbol{\theta}^{(M)})$, $E_M(\boldsymbol{\theta}^{(M)})$ などと書くことにする。

3 深層実 NN の特異点の解消

本章では、文献 15) に従って、第 2 章で述べた深層 NN の階層構造に基づいた危点の特性について述べる。

3.1 階層構造に基づいた危点の特性

まず、2 章で述べた M 深層 NN の危点を定義する。

定義 1 次の式が成り立つ時、パラメータ $\boldsymbol{\theta}^{(M)} \in \Theta_M$ を誤差関数 $E_M(\boldsymbol{\theta}^{(M)})$ の危点と呼ぶ。

$$\frac{\partial E_M(\boldsymbol{\theta}^{(M)})}{\partial \boldsymbol{\theta}^{(M)}} = \mathbf{0}. \quad (1)$$

ここで、 Θ_M は、 M 深層 NN のすべてのパラメータから成る集合である。□

次に、 $(M-1)$ 深層 NN を考える。 $(M-1)$ 深層 NN の中間層 k の中間ニューロンは、 M 深層 NN の中間層 k の中間ニューロンよりも 1 個少ない。このとき、階層構造に基づいた危点は、(定義 2 で定義される) 3 つの埋め込みを使って、 $(M-1)$ 深層 NN の中間層 k に 1 つの中間ニューロンを加えることによって構成される。

定義 2 中間層 k に中間ニューロン 2 から中間ニューロン M までの $(M-1)$ 個の中間ニューロンを持つ $(M-1)$ 深層 NN を考える (図 1 ~ 3 の右の図参照)。中間層 $k-1$ は M' 個の中間ニューロンを、中間層 $k+1$ は M'' 個の中間ニューロンをそれぞれ持つものと仮定する。また、 $\tilde{\mathbf{p}}_j = (\mathbf{p}_j^T \tau_j)^T$ と置く。ここで、 \mathbf{p}_j は中間

層 k における中間ニューロン j と中間層 $k-1$ との間の重みベクトル、 τ_j は中間層 k の中間ニューロン j の閾値である。また、 $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1 \cdots \xi_{M''})^T$, $\mathbf{s}_j = (s_{1j} \cdots s_{M''j})^T$ ($2 \leq j \leq M$) と置く。ここで、 ξ_l は中間層 $k+1$ における中間ニューロン l の閾値、 s_{lj} は中間層 $k+1$ における中間ニューロン l と中間層 k における中間ニューロン j との間の重みをそれぞれ表す。

(i) (図 1 参照) 任意の $\tilde{\mathbf{w}} \in \mathbf{R}^{M'+1}$ に対して、

$$\begin{aligned} \alpha \tilde{\mathbf{w}} : \Theta_{M-1} &\rightarrow \Theta_M, \\ \boldsymbol{\theta}^{(M-1)} &\mapsto (\cdots, \boldsymbol{\xi}^T, \mathbf{s}_1^T \equiv \mathbf{0}^T, \mathbf{s}_2^T, \cdots, \mathbf{s}_M^T, \\ &\quad \tilde{\mathbf{w}}^T, \tilde{\mathbf{p}}_2^T, \cdots, \tilde{\mathbf{p}}_M^T, \cdots)^T \quad (2) \end{aligned}$$

と定義する。ここで、

$$\boldsymbol{\theta}^{(M-1)} = (\cdots, \boldsymbol{\xi}^T, \mathbf{s}_2^T, \cdots, \mathbf{s}_M^T, \tilde{\mathbf{p}}_2^T, \cdots, \tilde{\mathbf{p}}_M^T, \cdots)^T.$$

(ii) (図 2 参照) 任意の $\mathbf{u} = (u_1 \cdots u_{M''})^T \in \mathbf{R}^{M''}$ と $\nu \in \mathbf{R}$ に対して、

$$\begin{aligned} \beta(\mathbf{u}, \nu) : \Theta_{M-1} &\rightarrow \Theta_M, \\ \boldsymbol{\theta}^{(M-1)} &\mapsto (\cdots, \boldsymbol{\xi}^T - \varphi(\nu) \mathbf{u}^T, \mathbf{u}^T, \mathbf{s}_2^T, \\ &\quad \cdots, \mathbf{s}_M^T, (\mathbf{0}^T, \nu), \tilde{\mathbf{p}}_2^T, \cdots, \tilde{\mathbf{p}}_M^T, \cdots)^T \quad (3) \end{aligned}$$

と定義する。ここで、 $\boldsymbol{\theta}^{(M-1)}$ は (i) のものと同じである。

(iii) (図 3 参照) 任意の $\lambda \in \mathbf{R}$ に対して、

$$\begin{aligned} \gamma_\lambda : \Theta_{M-1} &\rightarrow \Theta_M, \\ \boldsymbol{\theta}^{(M-1)} &\mapsto (\cdots, \boldsymbol{\xi}^T, \lambda \mathbf{s}_2^T, (1-\lambda) \mathbf{s}_2^T, \mathbf{s}_3^T, \\ &\quad \cdots, \mathbf{s}_M^T, \tilde{\mathbf{p}}_2^T, \tilde{\mathbf{p}}_2^T, \tilde{\mathbf{p}}_3^T, \cdots, \tilde{\mathbf{p}}_M^T, \cdots)^T \quad (4) \end{aligned}$$

と定義する。ここで、 $\boldsymbol{\theta}^{(M-1)}$ は (i) のものと同じである。□

定義 2 における 3 つの埋め込みはいずれも、 $(M-1)$ 深層 NN の任意のパラメータ $\boldsymbol{\theta}^{(M-1)}$ に対して、ニューラルネットワークの出力値を変えないようにニューロン 1 を追加することによって、 M 深層 NN のパラメータを与える。

埋め込み $\alpha \tilde{\mathbf{w}}(\boldsymbol{\theta}^{(M-1)})$ の場合、追加されるニューロン 1 と次の中間層 $k+1$ と間の重みベクトルがゼロ ($\mathbf{s}_1 \equiv \mathbf{0}$) なので、ニューロン 1 は次の中間層 $k+1$ に決して影響を与えない (図 1 参照)。

埋め込み $\beta(\mathbf{u}, \nu)(\boldsymbol{\theta}^{(M-1)})$ の場合、追加されるニューロン 1 の閾値 ν は必ずしもゼロではないが、ニューロン 1 と前の中間層 $k-1$ と間の重みベクトルがゼロなので、ニューロン 1 は次の

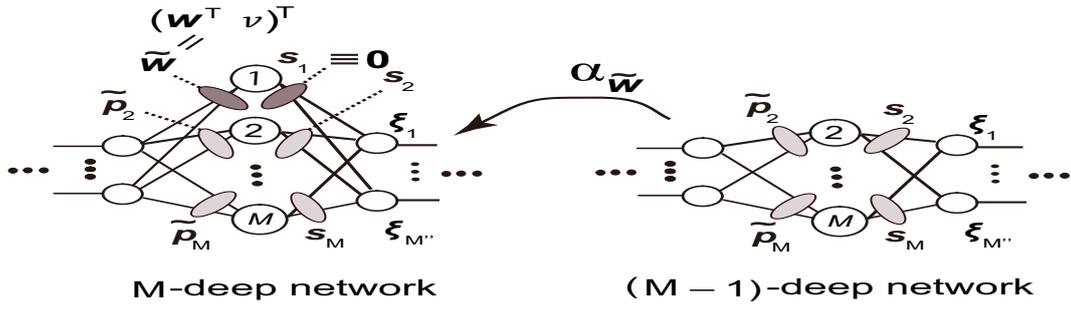


Fig. 1: Embedding $\alpha_{\tilde{w}}$.

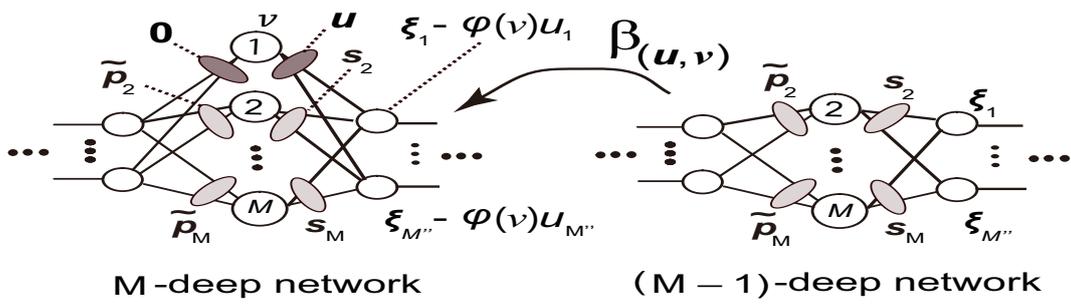


Fig. 2: Embedding $\beta_{(u,v)}$.

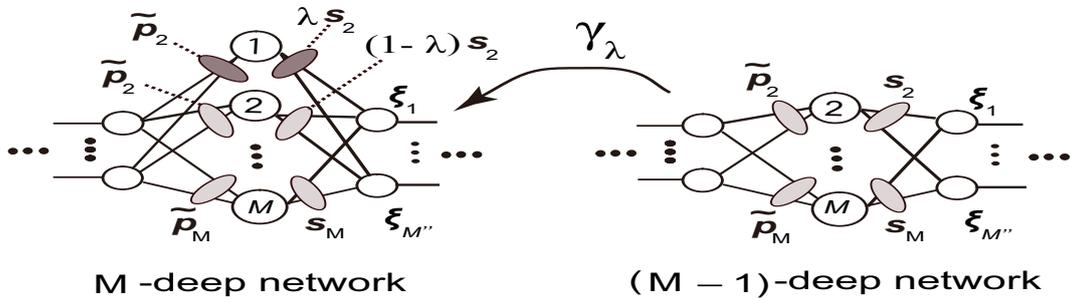


Fig. 3: Embedding γ_λ .

中間層 $k+1$ に決して影響を与えない (図 2 参照). ここで, 中間層 $k+1$ における各閾値 ξ_l から, ニューロン 1 の閾値に関係した値 $\varphi(\nu)u_l$ がから差し引かれていることに注意されたい.

埋め込み $\gamma_\lambda(\boldsymbol{\theta}^{(M-1)})$ の場合, $(M-1)$ 深層 NN における中間層 k の中間ニューロン 2 と次の中間層 $k+1$ との間の重みベクトル \boldsymbol{s}_2 を, 定数 λ を使って, $\lambda\boldsymbol{s}_2$ と $(1-\lambda)\boldsymbol{s}_2$ に比例分配する. そして, それらを M 深層 NN における新しく追加したニューロン 1 と中間層 $k+1$ の間の重みベクトル, ニューロン 2 と中間層 $k+1$ との間の重みベクトルにそれぞれ割り当てる (図 3 参照). さらに, 追加したニューロン 1 と中間層 $k-1$ との間の重みベクトルは, ニューロン 2 と中間層 $k-1$ との間の重みベクトル $\tilde{\boldsymbol{p}}_2$ に等しい. よって, ニューロン 1 を追加することによって, 深層 NN の出力値は決して変わらない.

定理 1 [文献 15] 中間層 k において中間ニューロン 2 から中間ニューロン M の $M-1$ 個の中間ニューロンを持つ $(M-1)$ 深層 NN を考える. $\boldsymbol{\theta}_*^{(M-1)} \in \Theta_{M-1}$ をその $(M-1)$ 深層 NN の誤差関数 E_{M-1} の危点とする. このとき, (i) (図 1 参照) もし $\tilde{\boldsymbol{w}} = (\mathbf{0}^T, \nu)^T$ ならば, 点 $\boldsymbol{\theta}_*^{(M)} = \alpha\tilde{\boldsymbol{w}}(\boldsymbol{\theta}_*^{(M-1)})$ は, 任意の $\nu \in \mathbf{R}$ に対して, M 深層 NN の誤差関数 E_M の危点である. ここで, ν は中間層 k に新しく追加されたニューロン 1 の閾値である. (ii) (図 2 参照) 点 $\boldsymbol{\theta}_*^{(M)} = \beta(\mathbf{0}, \nu)(\boldsymbol{\theta}_*^{(M-1)})$ は, 任意の $\nu \in \mathbf{R}$ に対して, M 深層 NN の誤差関数 E_M の危点である. ここで, ν は中間層 k に新たに追加されたニューロン 1 の閾値である. (iii) (図 3 参照) 点 $\boldsymbol{\theta}_*^{(M)} = \gamma_\lambda(\boldsymbol{\theta}_*^{(M-1)})$ は, 任意の $\lambda \in \mathbf{R}$ に対して, M 深層 NN の誤差関数 E_M の危点である. □

定理 1 における危点を, 階層構造に基づいた危点と呼ぶ.

3.2 階層構造に基づいた危点を持たないための十分条件

次の系は, 階層構造に基づいた危点を持たないための十分条件である. 用いる学習アルゴリズムに依らずに適用できる.

系 1 [文献 15] 第 2 章で定義した M 深層 NN を考える. ただし, $M' \geq M$, つまり, 中間層 $k-1$ の中間ニューロン数が中間層 k の中間ニューロン数と等しいか, または, 多いものとする. 中間層 k に対して, 次の条件が成り立って

いると仮定する. (a) 任意の $1 \leq l \leq M$ に対して, $\boldsymbol{w}_l \neq \mathbf{0}, \boldsymbol{v}_l \neq \mathbf{0}$, (b) 任意の相異なる 2 つの重みベクトルが直交する. つまり, $l_1 \neq l_2$ なる任意の $1 \leq l_1, l_2 \leq M$ に対して, $\boldsymbol{w}_{l_1}^T \cdot \boldsymbol{w}_{l_2} = 0$. ここで, \boldsymbol{w}_l は中間層 k における中間ニューロン l と中間層 $k-1$ との間の重みベクトル, \boldsymbol{v}_l は中間層 k における中間ニューロン l と中間層 $k+1$ との間の重みベクトルである. このとき, M 深層 NN は, 中間層 k において, 階層構造に基づいた危点を持たない. □

4 深層複素 NN の特異点

本章では, 深層複素 NN と等価な複素型深層実 NN の一部の特異点が解消されていることを示す.

複素 NN は通常の実数型の NN を複素領域に拡張した NN であり, 入力信号, 重み, 閾値, 出力信号はすべて複素数, 各複素ニューロンの活性化関数は複素関数である¹⁰⁻¹²).

系 1 において, M 深層 NN は $M' \geq M$ という制約を持っている. つまり, 中間層 $k-1$ における中間ニューロン数 M' は, 中間層 k における中間ニューロン数 M に等しいか, または多い.

$M' < M$ の場合, 系 1 の条件 (b) (重みベクトルの直交性) は成り立たない. なぜならば, M' 次元空間において, M 個の重みベクトルは直交することができないからである ($M' < M$ であることに注意されたい). しかしながら, M 個のうちの一部の重みベクトルが, 系 1 の条件 (b) を満たしている場合でも, 一部の「階層構造に基づいた危点」は解消され, 結果として学習性能が改善されると考えられる. 以下, 複素型深層実 NN はそのような特性を持っていることを具体例で示す.

例 1 2-3-2-1 複素 NN を考える. ここでは, 特に, 入力層と最初の間層との間の重みに焦点を当て, 次の記法を用いる (図 4 の左の 2 つの図参照). $a_1 + ib_1 \in \mathbf{C}$ を入力ニューロン 1 と中間ニューロン 1 との間の重み, $a_2 + ib_2 \in \mathbf{C}$ を入力ニューロン 2 と中間ニューロン 1 との間の重み, $c_1 + id_1 \in \mathbf{C}$ を入力ニューロン 1 と中間ニューロン 2 との間の重み, $c_2 + id_2 \in \mathbf{C}$ を入力ニューロン 2 と中間ニューロン 2 との間の重みとする. ここで, \mathbf{C} は複素数全体の集合である. 2-3-2-1 複素 NN は, 4-6-4-2 実 NN に等価である¹³). ここで, 最初の間層における 4 つの中間ニューロン 1 ~ 4 の重み

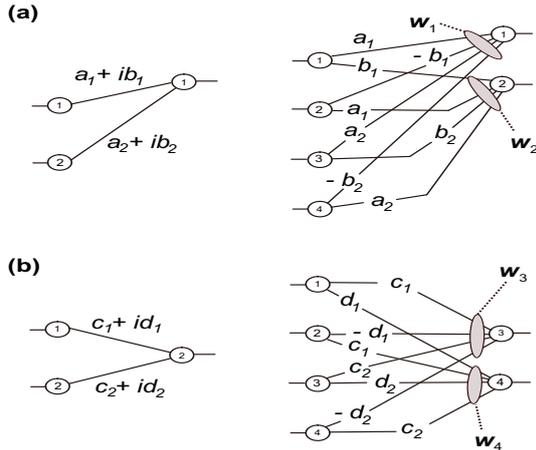


Fig. 4: An illustrative example of the relationship of the weights between the 2-3-2-1 complex-valued neural network and the 4-6-4-2 real-valued neural network. The two networks are equivalent to each other. (a) Left figure shows the network consisted of the input layer and the hidden neuron 1 of the first hidden layer in the 2-3-2-1 complex-valued neural network. Right figure shows the network consisted of the input layer and the hidden neurons 1 and 2 of the first hidden layer in the 4-6-4-2 real-valued neural network. (b) Left figure shows the network consisted of the input layer and the hidden neuron 2 of the first hidden layer in the 2-3-2-1 complex-valued neural network. Right figure shows the network consisted of the input layer and the hidden neurons 3 and 4 of the first hidden layer in the 4-6-4-2 real-valued neural network.

ベクトルは $\mathbf{w}_1 = (a_1 \ -b_1 \ a_2 \ -b_2)^T$, $\mathbf{w}_2 = (b_1 \ a_1 \ b_2 \ a_2)^T$, $\mathbf{w}_3 = (c_1 \ -d_1 \ c_2 \ -d_2)^T$, $\mathbf{w}_4 = (d_1 \ c_1 \ d_2 \ c_2)^T$ でそれぞれ与えられる (図 4 の右の 2 つの図参照). このとき, \mathbf{w}_1 と \mathbf{w}_2 , \mathbf{w}_3 と \mathbf{w}_4 はそれぞれ直交している. なぜならば, $\mathbf{w}_1^T \cdot \mathbf{w}_2 = \mathbf{w}_3^T \cdot \mathbf{w}_4 = 0$ だからである. しかしながら, たとえば, \mathbf{w}_1 と \mathbf{w}_3 は必ずしも直交していない. それは $\mathbf{w}_1^T \cdot \mathbf{w}_3 = a_1c_1 + b_1d_1 + a_2c_2 + b_2d_2$ だからである. このように, 複素型 4-6-4-2 実 NN の一部の重みベクトルは, 系 1 の条件 (b) を重みの構造として満たしている. \square

注意 1 $(N+2)$ 層の $1-1-\dots-1-1$ 複素 NN と等価な $(N+2)$ 層の $2-2-\dots-2-2$ 実 NN を考える. この複素型深層実 NN の中間ニューロンのすべての重みベクトルは, 系 1 の条件 (b) を重みの構造として満たす. \square

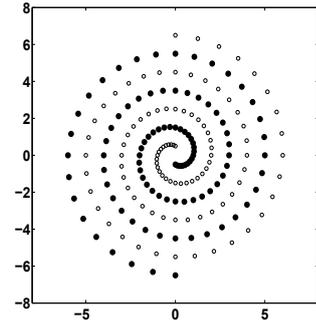


Fig. 5: Learning pattern of the two spirals problem

5 実験

本章では, 4 章で述べた複素型深層実 NN, つまり, 深層複素 NN に関する実験結果を報告する.

5.1 Two Spirals 問題

Two spirals 問題は NN のためのベンチマーク問題の一つであり, 極端な非線形性を持つため, 解くことが困難な問題として知られている¹⁴⁾. 入学習パターンは 2 次元平面上の 2 つの絡み合った螺旋上の 194 個の点であり, 出学習パターンは入学習パターンが一つの螺旋上の点であれば 1 (白), もう一方の螺旋上の点であれば 0 (黒) である (図 5).

Lang らは, 数個の中間層を持つ多層実 NN で標準的な BP¹⁶⁾ を使ったが, Two spirals 問題を解けなかったと報告している¹⁴⁾. そこで, 彼らは, すべての層の各ニューロンは他の層のすべてのニューロンへの結合 (Lang らはこれを近道と呼んだ) を持っているような実 NN を考案し, 2-5-5-5-1 実 NN (中間層は 3 つ) で標準的な BP を使って, Two spirals 問題を解くことに成功した.

5.2 実験の条件

複素型深層実 NN, つまり, 深層複素 NN で標準的な複素 BP¹⁰⁾ を使って, Two spirals 問題を解くことを試み, 解くために中間層がいくつ必要かを見極めた. 深層複素 NN は, 入力ニューロンと出力ニューロンをそれぞれ 1 つずつ持つものとした. 入学習パターン $(x, y) \in \mathbf{R}^2$ に対して, 複素数 $x+iy \in \mathbf{C}$ を深層複素 NN に入力するようにした. 重みと閾値のそれぞれの実部と虚部の初期値は -0.1 と $+0.1$ の間の乱数で与えた. 文献 14) と同様にして, NN は次の場合に入学習パターンを識別できたとみなし

た：教師信号0（黒）に対して，出力ニューロンの実部が0.0から0.4の間の値を出力，教師信号1（白）に対して，出力ニューロンの実部が0.6から1.0の間の値を出力．出力ニューロンの虚部は学習に使わなかった．194個の学習パターンのNNへの提示を1回の学習とした．

5.3 実験結果

まず，3層の $1-n-1$ 複素NNで実験を行った（ $10 \leq n \leq 150$ ）．学習率 ε は0.001から0.4の間の値を用いた．最大学習回数を150万回として実験したが，Two spirals問題を解くことはできなかった．最も多くの学習パターンを学習できたのは， $1-40-1$ 複素NNで，学習率を $\varepsilon = 0.1$ とした場合で，194個の学習パターンのうち190個の学習パターンを学習できた．

次に，4層の $1-m-n-1$ 複素NNで実験を行った．学習率は $\varepsilon = 0.01$ とし，中間ニューロン数 m と n をいろいろな値に変えて実験したところ，Two spirals問題を解くことができた．最大学習回数を20万回とし，100回の試行の収束した割合（収束率）と収束するのにかかった平均学習回数を調べた．実験結果を表1に示す．最小学習回数とパラメータ数（重みと閾値の総数）も合わせて掲載してある．ここで，複素数は実部と虚部から成るので，1つの複素パラメータは2個のパラメータとして計算してある．

図6は，学習終了後の，領域 $[-6.5, 6.5] \times [-6.5, 6.5]$ 上のテストパターンに対する $1-6-7-1$ 複素NNの出力ニューロンおよび中間ニューロンの出力値を明示したものである．上段の図は出力ニューロンの出力値の実部を明示したものであり，中段の3つの図は2番目の中間層の中間ニューロン3，4および5の出力値のプロット，下段の3つの図は最初の中間層の中間ニューロン3，4および5の出力値のプロットである．色は出力値の状態を表していて，その意味は次のとおりである．黒：実部 **OFF** (0.0-0.4) かつ虚部 **OFF**，濃い灰色：実部 **OFF** かつ虚部 **ON** (0.6-1.0)，やや濃い灰色：実部 **ON** かつ虚部 **OFF**，灰色：実部 **ON NEITHER SIDE** (0.4-0.6) かつ虚部 **ON NEITHER SIDE**，白：実部 **ON** かつ虚部 **ON**．

5.4 考察

5.3節において，4層複素NN，すなわち，複素型4層実NNがTwo spirals問題を標準的複素BPを用いて解けることを示した．表1から，

パラメータ数が増えるにつれて，収束率が高くなり，平均学習回数が概ね小さくなる傾向があることが分かる．

Two spirals問題には194個の学習パターンがあるので，NNは194ビットの情報を記憶しなければならない．Langらは，近道を持つ5層の $1-5-5-5-1$ 実NNを用いた．そのパラメータ数は138個である．彼らは，「一つのパラメータは1.5ビットの情報を容易に学習できる」という経験則に基づいて，Two spirals問題を解くためには， $194/1.5 = 130$ 個程度のパラメータが必要と判断した¹⁴⁾．一方，表1から，複素NNがTwo spirals問題を解くために，少なくとも138個のパラメータを必要としたことが分かる．すなわち，近道のある実NNと近道の無い複素NNはTwo spirals問題を解くために，同数のパラメータを必要とした．当然ながら，それらのネットワーク構造は本質的に異なったものである．

文献17)において指摘されているように，1つの複素ニューロンの決定表面は2つの互いに直交した超平面から構成される．それに対して，1つの実ニューロンの決定表面は1本の直線である．図6を見ると，最初の間層における各中間ニューロンの決定表面は2つの互いに直交した直線から構成されていることが分かる．そして，2番目の中間層における中間ニューロンの決定表面は非線形性を持ったものに変化している．文献14)では，近道を持つ5層実NNの最初の間層における中間ニューロンの決定表面はいずれも直線であり，様々な角度を持っている様子が示されている．

標準的実BPを用いて，数個の中間層を持つ実NNではTwo spirals問題を解くことができなかった¹⁴⁾．それに対して，4層複素NNは標準的複素BPを用いて解くことができた(5.3節)．4章において見たように，深層複素NNは深層実NNに比べて特異点が少ない．4層複素NNが標準的複素BPを用いてTwo spirals問題を解くことができたのはこのことが一因ではないかと推測している．

6 結論

深層複素NNは，深層実NNに比べて特異点が少ないことを示した．そのため，深層複素NNはローカルミニマムやプラトーに陥ることが少ないと考えられる．深層実NNで標準的BPを使う場合，数個の中間層を持つ深層実NNで極

Table 1: Experimental results on the two spirals problem by four-layered complex-valued neural networks.

NN	収束率 (%)	平均学習回数	最小学習回数	パラメータ数
1-5-5-1	0	–	–	92
1-6-6-1	0	–	–	122
1-6-7-1	1	68,000	68,000	138
1-7-6-1	3	76,000	70,000	138
1-7-7-1	7	140,429	99,000	156
1-8-8-1	17	117,059	47,000	194
1-9-9-1	23	111,609	36,000	236
1-10-10-1	40	100,350	22,000	282
1-11-11-1	40	85,750	27,000	332
1-12-12-1	48	79,750	30,000	386
1-13-13-1	48	72,083	25,000	444
1-14-14-1	46	50,717	26,000	506

端な非線形性を持つ Two spirals 問題は解けなかったと報告されている。それに対して、深層複素 NN で標準的複素 BP を使って、Two spirals 問題を解かせたところ、4 層の複素 NN で解けることが分かった。これは、深層複素 NN の特異点が深層実 NN に比べて少ないことが一因ではないかと推測される。

謝辞 本研究は JSPS 科研費 JP16K00347 の助成を受けたものです。

参考文献

- 1) Y. Bengio, P. Lamblin, D. Popovici, and H. Larochelle: Greedy layer-wise training of deep networks, in *Advances in Neural Information Processing Systems 19 (NIPS'06)*, (B. Schölkopf, J. Platt, and T. Hoffman, eds.), 153/160 (2007).
- 2) Y. Bengio: Learning deep architectures for AI, *Foundations and Trends in Machine Learning*, 2(1), 1/127 (2009).
- 3) D. Erhan, P.-A. Manzagol, Y. Bengio, S. Bengio, and P. Vincent: The difficulty of training deep architectures and the effect of unsupervised pretraining, in *Proc. Twelfth Int. Conf. on Artificial Intelligence and Statistics (AISTATS'09)*, 153/160 (2009).
- 4) H. Larochelle, Y. Bengio, J. Louradour, and P. Lamblin: Exploring strategies for training deep neural networks, *Journal of Machine Learning Research*, Vol. 10, 1/40 (2009).
- 5) G. E. Hinton, S. Osindero, and Y. Teh: A fast learning algorithm for deep belief nets, *Neural Computation*, Vol. 18, 1527/1554 (2006).
- 6) S. Amari, H. Park, and T. Ozeki: Singularities affect dynamics of learning in neuromanifolds, *Neural Computation*, 18(5), 1007/1065 (2006).
- 7) F. Cousseau, T. Ozeki, and S. Amari: Dynamics of learning in multilayer perceptrons near singularities, *IEEE Trans. Neural Networks*, 19(8), 1313/1328 (2008).
- 8) T. Nitta: Learning dynamics of a single polar variable complex-valued neuron, *Neural Computation*, 27(5), 1120/1141 (2015).
- 9) K. Fukumizu and S. Amari: Local minima and plateaus in hierarchical structures of multilayer perceptrons, *Neural Networks*, 13(3), 317/327 (2000).
- 10) T. Nitta: An extension of the back-propagation algorithm to complex num-

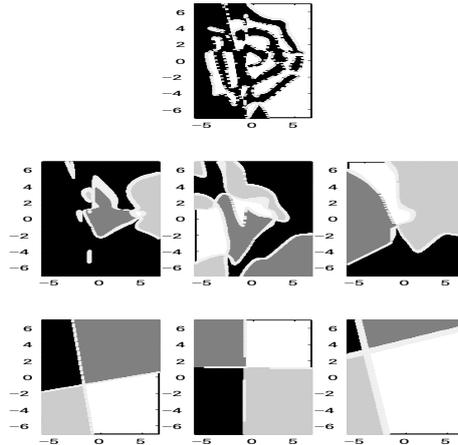


Fig. 6: Plots of some of the hidden neurons and the output neuron of the $1 - 6 - 7 - 1$ complex-valued neural network after learning.

- bers, *Neural Networks*, 10(8), 1392/1415 (1997).
- works, *Neural Computation*, 16(1), 73/97 (2004).
- 11) T. Nitta, (Ed.): *Complex-Valued Neural Networks: Utilizing High-Dimensional Parameters*. Information Science Reference, Pennsylvania, USA (2009).
 - 12) A. Hirose, (Ed.): *Complex-Valued Neural Networks: Advances and Applications*. IEEE PressWiley (2013).
 - 13) T. Nitta: An analysis of the fundamental structure of complex-valued neurons, *Neural Processing Letters*, 12(3), 239/246 (2000).
 - 14) K. J. Lang and M. J. Witbrock: Learning to tell two spirals apart, In *Proc. the Connectionist Models Summer School*, Morgan Kaufmann, 52/59 (1988).
 - 15) T. Nitta: Resolution of singularities introduced by hierarchical structure in deep neural networks, *IEEE Trans. Neural Networks and Learning Systems* (accepted).
 - 16) D. E. Rumelhart et al.: *Parallel Distributed Processing*. Vol.1, MIT Press (1986).
 - 17) T. Nitta: Orthogonality of decision boundaries in complex-valued neural net-

パラメータの自動調整が可能な カオス四元数多方向連想メモリの改良

白石充 ○ 長名優子 (東京工科大学)

Improved Chaotic Quaternionic Multidirectional Associative Memory with Adaptive Scaling Factor

M. Shiraishi and *Y. Osana (Tokyo University of Technology)

Abstract— In this paper, we propose an Improved Chaotic Quaternionic Multidirectional Associative Memory (ICQMAM) with adaptive scaling factor of refractoriness. The proposed model can determine appropriate parameters automatically. In this model, scaling factor of refractoriness α varies depends on time and internal states of neurons. We examined one-to-many associations ability of the proposed model, the conventional CQMAM with adaptive scaling factor of refractoriness and the conventional CQMAM. And, we confirmed that one-to-many association ability of the proposed model is almost equal to that of well-tuned CQMAM and it is superior to that of the conventional CQMAM with adaptive scaling factor of refractoriness.

Key Words: Chaotic Quaternionic Neuron, Multidirectional Associative Memory

1 はじめに

生物の脳や神経系に見られるような柔軟な情報処理を行う手法として、ニューラルネットワークの研究が盛んに行われており、様々な連想記憶モデルが提案されている^{1)–5)}。しかし、これらの連想メモリは2値パターンを扱うことを前提としており、多値パターンを扱うことはできない。多値パターンを扱うことができるモデルとして複素ニューロンモデル⁶⁾⁷⁾や四元数ニューロンモデル⁸⁾が提案されている。これらのモデルは、ニューロンの入出力や内部状態を複素数値や四元数値にしたモデルで、複素数値や四元数値を多値に割り当てることで、多値パターンを扱うことができる^{9)–12)}。

一方で、柔軟な情報処理を行う手法の一つとしてカオスが注目されている。カオスは、決定論的な時間発展をする非線形なシステムに生じる長期予測不可能な現象で、生物の脳や神経系でも観測されており、脳における記憶や学習に重要な役割を果たしていると考えられている¹³⁾。ニューラルネットワークの研究においても、実際の神経細胞においてみられる時空間加算、不応性、連続値出力などを考慮することでカオスを導入したカオスニューロンモデル¹⁴⁾が提案されている。また、カオスニューロンモデルから構成される連想メモリでは、記憶したパターンを動的に想起できることが知られている¹⁴⁾¹⁵⁾。カオス双方向連想メモリ¹⁶⁾では、双方向連想メモリ³⁾の一部にカオスニューロンモデルを導入することで、1対多の連想を実現している。

複素ニューロンモデル⁶⁾⁷⁾とカオスニューロンモデル¹⁴⁾を組み合わせたカオス複素ニューロンモデル¹⁷⁾¹⁸⁾や四元数ニューロンモデル⁸⁾とカオスニューロンモデルを組み合わせたカオス四元数ニューロンモデル¹⁹⁾も提案されている。カオス複素ニューロンモデルから構成されるカオス複素連想メモリ¹⁷⁾¹⁸⁾では、多値パターンの動的な想起が実現されている。

また、四元数ニューロンモデル⁸⁾とカオス四元数ニューロンモデル¹⁹⁾を用いたカオス四元数多方向連想メモリ²⁰⁾が提案されている。これに対して、パラメータと1対多の想起能力の関係を調べる研究²¹⁾も

行われており、その結果に基づいて、パラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリ²²⁾が提案されている。これはカオス四元数多方向連想メモリにおいて不応性のスケーリングファクタを内部状態に応じて変化させることでパラメータを自動調整できるようにしたモデルである。しかし、試行錯誤によってパラメータを調整したカオス四元数多方向連想メモリの想起能力を下回ってしまっていることが確認されている。

それに対し、パラメータの自動調整が可能なカオス多方向連想メモリ²³⁾が提案されている。このモデルはカオス多方向連想メモリ²⁴⁾において、その時刻までの内部状態の最大値に基づいてパラメータを自動調整するモデルであり、試行錯誤によってパラメータを調整したカオス多方向連想メモリと同等の想起能力が得られることが確認されている。

本研究では、カオス四元数多方向連想メモリのパラメータの自動調整方法の検討を行う。パラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリ²²⁾では、各時刻の内部状態の値を用いてパラメータの調整を行っている。それに対し、提案モデルでは、パラメータの自動調整が可能なカオス多方向連想メモリ²³⁾と同様に、カオス四元数多方向連想メモリにおいて、様々なパラメータで想起率を調べる実験を行い、想起率が高くなる時の値とその時刻までの内部状態の最大値に基づいて決定することで自動調整を実現する。

2 カオス四元数ニューロンモデル

ここでは、提案するパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリで用いるカオス四元数ニューロンモデル¹⁹⁾について説明する。カオス四元数ニューロンモデルは、ニューロンの入出力や内部状態として四元数を扱えるようにカオスニューロンモデル¹⁴⁾を拡張したモデルであり、カオス四元数ニューロンモデルから構成されるカオス四元数連想メモリでは、四元数で表されたパターンの動的な想起を行うことができることが知られている¹⁹⁾。

2.1 カオス四元数ニューロンモデル

カオス四元数ニューロンモデルのダイナミクスは以下のように表される。

$$\mathbf{x}(t+1) = f \left(\mathbf{A}(t) - \alpha \sum_{d=0}^t k^d \mathbf{x}(t-d) - \boldsymbol{\theta} \right) \quad (1)$$

(ただし、 $\mathbf{A}(t), \mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{H}$, $k, \alpha \in \mathbb{R}$)

ここで、 $\mathbf{x}(t)$ は時刻 t におけるニューロンの出力、 $\mathbf{A}(t)$ は時刻 t における外部入力、 α は不応性に関するスケールリングファクタ、 k は時間減衰定数、 $\boldsymbol{\theta}$ はニューロンの閾値である。また、 \mathbb{H} は四元数の集合、 \mathbb{R} は実数の集合を表している。また、 $f(\cdot)$ は出力関数であり、以下のように与えられる。

$$f(\mathbf{u}) = f^{(e)}(u^{(e)}) + f^{(i)}(u^{(i)})\mathbf{i} + f^{(j)}(u^{(j)})\mathbf{j} + f^{(k)}(u^{(k)})\mathbf{k} \quad (2)$$

$$\begin{aligned} f^{(e)}(u) &= f^{(i)}(u) = f^{(j)}(u) = f^{(k)}(u) \\ &= \tanh\left(\frac{u}{\varepsilon}\right) \end{aligned} \quad (3)$$

ここで、 ε は関数の傾きを決めるパラメータである。

2.2 時間的に変化する不応性のスケールリングファクタを有するカオス四元数ニューロンモデル

カオスニューロンモデル¹⁴⁾では、通常、不応性のスケールリングファクタは定数として扱われる。それに対し、文献¹⁵⁾ではカオスニューロンモデルの不応性のスケールリングファクタを時間的に変化させることで動的な想起能力が向上することが示されている。またカオス複素ニューロンモデル¹⁸⁾から構成されるカオス複素多方向連想メモリ²⁵⁾においても不応性のスケールリングファクタを動的に変化させることで1対多の想起能力が向上することが知られている²⁶⁾。カオス四元数ニューロンモデルから構成されるネットワークにおいても、不応性のスケールリングファクタを時間的に変化させることで動的な想起能力が向上する。

時間的に変化する不応性のスケールリングファクタを有するカオス四元数ニューロンモデルのダイナミクスは、以下のように与えられる。

$$\mathbf{x}(t+1) = f \left(\mathbf{A}(t) - \alpha(t) \sum_{d=0}^t k^d \mathbf{x}(t-d) - \boldsymbol{\theta} \right) \quad (4)$$

(ただし、 $\mathbf{A}(t), \mathbf{x}(t), \boldsymbol{\theta} \in \mathbb{H}$, $k, \alpha(t) \in \mathbb{R}$)

ここで、 $\alpha(t)$ は時刻 t における不応性のスケールリングファクタである。不応性のスケールリングファクタの変化のさせ方としては様々なものが考えられるが、カオス四元数ニューロンモデルにおいても時間的に変化する不応性のスケールリングファクタを有するカオス連想メモリ¹⁵⁾やカオス複素多方向連想メモリ²⁵⁾で用いられているのと同様に、

$$\alpha(t) = a + b \cdot \sin\left(c \cdot \frac{\pi}{12} \cdot t\right) \quad (5)$$

としている。ここで、 a, b, c は不応性のスケールリングファクタの変化のさせ方を決めるパラメータである。

3 パラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリ

ここでは、提案するパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリについて説明する。カオス四元数多方向連想メモリ²⁰⁾において、パラメータを自動調整する方法は文献²⁰⁾で提案されており、このモデルでは、不応性のスケールリングファクタをカオス四元数ニューロンモデルの内部状態の値に基づいて決定しているが、試行錯誤によってパラメータを調整したモデルよりも1対多の想起能力は低くなってしまっている。それに対し、パラメータの自動調整が可能なカオス多方向連想メモリ²²⁾では、不応性のスケールリングファクタをその時刻までの内部状態の最大値に基づいて決定する方法が提案されており、試行錯誤によってパラメータを調整したモデルと同程度の1対多の想起能力が得られることが確認されている。そこで、本論文では、カオス四元数多方向連想メモリ²²⁾において、その時刻までの内部状態の最大値に応じて不応性のスケールリングファクタの値を自動調整することで、1対多の想起能力の向上を目指す。

3.1 構造

カオス四元数多方向連想メモリは、多方向連想メモリ⁴⁾と同様に3つ以上の層から構成されており、Fig.1の例ではX層、Y層、Z層の3つの層から構成されている。各層は、Fig.1に示すようにキー入力部 (Key Input Part) と文脈情報部 (Context Part) の2つに分けられている。キー入力部は四元数ニューロンモデルから、文脈情報部はカオス四元数ニューロンモデルから構成されている。

3.2 学習過程

相関学習では1対多の関係にある学習組を記憶することはできない。カオス双方向連想メモリ¹⁶⁾では、1対多の関係にある学習組に文脈情報パターンを付加することで擬似的に1対1の関係に変換し、1対多の関係にある学習組の記憶を実現している。カオス四元数多方向連想メモリでは、直交学習を用いて学習を行うが、直交学習でも相関学習と同様、1対多の関係にある学習組を記憶することができないため、同様の方法を用いる。

$$\{(\mathbf{X}_1, \mathbf{Y}_1, \mathbf{Z}_1), (\mathbf{X}_1, \mathbf{Y}_2, \mathbf{Z}_2), (\mathbf{X}_2, \mathbf{Y}_3, \mathbf{Z}_3)\} \quad (6)$$

のような1対多の関係にある学習組を3つの層から構成されるカオス四元数多方向連想メモリに学習させる

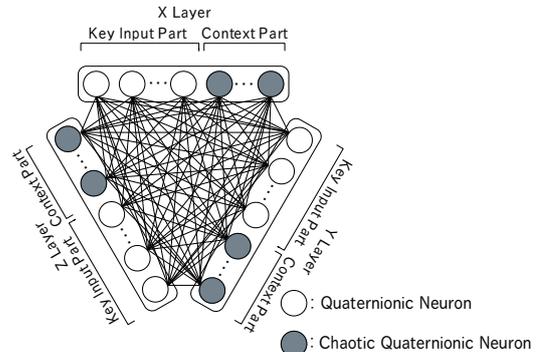


Fig. 1: Structure of Chaotic Quaternionic Multidirectional Associative Memory.

場合、各学習組に異なった文脈情報パターンを付加することで以下のような1対1の学習組を擬似的に得ることができる。

$$\begin{aligned} & \{(X_1-C_{X1}, Y_1-C_{Y1}, Z_1-C_{Z1}), \\ & (X_1-C_{X2}, Y_2-C_{Y2}, Z_2-C_{Z2}), \\ & (X_2-C_{X3}, Y_3-C_{Y3}, Z_3-C_{Z3})\} \end{aligned} \quad (7)$$

なお、文脈情報パターンは異なったパターンでありさえすれば構わないので、ランダムに生成したパターンを用いる。

3つの層から構成されるカオス四元数多方向連想メモリでは、文脈情報を付加したパターンを用いて各層の間の重みを直交学習により以下のように決定する。

$$w^{YX} = Y(X^*X)^{-1}X^* \quad (8)$$

$$w^{XY} = X(Y^*Y)^{-1}Y^* \quad (9)$$

$$w^{ZX} = Z(X^*X)^{-1}X^* \quad (10)$$

$$w^{XZ} = X(Z^*Z)^{-1}Z^* \quad (11)$$

$$w^{ZY} = Z(Y^*Y)^{-1}Y^* \quad (12)$$

$$w^{YZ} = Y(Z^*Z)^{-1}Z^* \quad (13)$$

ここで、*は共役転置、 -1 は逆行列を表す。また、 X 、 Y 、 Z は学習パターン行列であり、それぞれ

$$X = \{X^{(1)}, \dots, X^{(p)}, \dots, X^{(P)}\} \quad (14)$$

$$Y = \{Y^{(1)}, \dots, Y^{(p)}, \dots, Y^{(P)}\} \quad (15)$$

$$Z = \{Z^{(1)}, \dots, Z^{(p)}, \dots, Z^{(P)}\} \quad (16)$$

で与えられる。ここで、 $X^{(p)}$ 、 $Y^{(p)}$ 、 $Z^{(p)}$ はX層、Y層、Z層の文脈情報パターンを含む学習パターン p 、 P は学習パターンの数を表す。

M 個の層から構成されるカオス四元数多方向連想メモリでは、 x 層から y 層への重み、 y 層から x 層への重みはそれぞれ

$$w^{yx} = X_y(X_x^*X_x)^{-1}X_x^* \quad (17)$$

$$w^{xy} = X_x(X_y^*X_y)^{-1}X_y^* \quad (18)$$

で与えられる。ここで、 X_x 、 X_y はそれぞれ x 層、 y 層に記憶させる学習パターン行列であり

$$X_x = \{X_x^{(1)}, \dots, X_x^{(p)}, \dots, X_x^{(P)}\} \quad (19)$$

$$X_y = \{X_y^{(1)}, \dots, X_y^{(p)}, \dots, X_y^{(P)}\} \quad (20)$$

で与えられる。

3.3 想起過程

カオス四元数多方向連想メモリでは、3.2で述べたように文脈情報パターンを付加した学習組を用いて学習を行うが、想起時には文脈情報パターンは未知であると考えるのが自然であるため、キー入力のみからの想起を行う。

式(7)の学習組では、例えば X_1 がカオス四元数多方向連想メモリに与えられる入力となる。カオス四元数多方向連想メモリにおいて、 X_1 が入力として与えられると、文脈情報パターンに相当する部分のカオス

四元数ニューロンの状態がカオスによって遷移することにより

$$(X_1-0, ?, ?) \rightarrow \dots \rightarrow (X_1-C_{X1}, Y_1, Z_1) \rightarrow \dots \rightarrow (X_1-C_{X2}, Y_2, Z_2) \rightarrow \dots$$

のように1対多の想起が行われることが期待できる。

3つの層から構成されるカオス四元数多方向連想メモリにおいてX層に入力が与えられた場合、想起は以下のように行われる。

Step 1: X層への入力

X層のキー入力部にパターンを入力する。

Step 2: X層からY層、Z層への伝搬

X層の情報は、Y層とZ層のキー入力部へと伝搬される。Y層のキー入力部のニューロン k の時刻 t における出力 $x_k^Y(t)$ は

$$x_k^Y(t) = f \left(\sum_{j=1}^{N^X} w_{kj}^{YX} x_j^X(t) \right) \quad (21)$$

で与えられる。ここで、 N^X はX層のニューロン数、 w_{kj}^{YX} はX層のニューロン j からY層のニューロン k への重み、 $x_j^X(t)$ はX層のニューロン j の時刻 t における出力を表す。また、 $f(\cdot)$ は式(2)で与えられる出力関数である。

Z層のキー入力部のニューロン l の時刻 t における出力 $x_l^Z(t)$ は

$$x_l^Z(t) = f \left(\sum_{j=1}^{N^X} w_{lj}^{ZX} x_j^X(t) \right) \quad (22)$$

で与えられる。ここで、 w_{lj}^{ZX} はX層のニューロン j からZ層のニューロン l への重みを表す。

Step 3: Y層、Z層からX層への伝搬

X層のキー入力部のニューロン j の時刻 $t+1$ における出力 $x_j^X(t+1)$ は

$$x_j^X(t+1) = f \left(\sum_{k=1}^{n^Y} w_{jk}^{XY} x_k^Y(t) + \sum_{l=1}^{n^Z} w_{jl}^{XZ} x_l^Z(t) + v A_j^x \right) \quad (23)$$

で与えられる。ここで、 n^Y はY層のキー入力部のニューロン数、 n^Z はZ層のキー入力部のニューロン数、 w_{jk}^{XY} はY層のニューロン k からX層のニューロン j への重み、 w_{jl}^{XZ} はZ層のニューロン l からX層のニューロン j への重み、 v は外部入力に対する重み、 A_j^x はX層のニューロン j への外部入力を表す。なお、外部入力として与えられるパターンについては3.4で詳しく述べる。

X層の文脈情報部のニューロン j の時刻 $t+1$ にお

る出力 $\mathbf{x}_j^X(t+1)$ は

$$\mathbf{x}_j^X(t+1) = f \left(\sum_{k=1}^{n^Y} \mathbf{w}_{jk}^{XY} \sum_{d=0}^t k_m^d \mathbf{x}_k^Y(t-d) + \sum_{l=1}^{n^Z} \mathbf{w}_{jl}^{XZ} \sum_{d=0}^t k_m^d \mathbf{x}_l^Z(t-d) - \alpha(t) \sum_{d=0}^t k_r^d \mathbf{x}_j^X(t-d) \right) \quad (24)$$

で与えられる。ここで、 k_m , k_r は時間減衰定数である。式 (24) において $\alpha(t)$ は時刻 t における不応性のスケールリングファクタであるが、このモデルではこの値を時間的に変化させることで 1 対多の想起能力を向上させている。なお、 $\alpha(t)$ の変化のさせ方としては様々な方法が考えられるがカオス四元数多方向連想メモリでは式 (5) を用いている。

提案モデルでは、時間的に変化する不応性のスケールリングファクタ $\alpha(t)$ の代わりに、時刻 t までの内部状態の最大値が $I(t)_{max}$ のときの時刻 t における不応性のスケールリングファクタ $\alpha(t, I(t)_{max})$ を用いる。不応性のスケールリングファクタ $\alpha(t, I(t)_{max})$ は

$$\alpha(t, I(t)_{max}) = a(I(t)_{max}) + b(a(I(t)_{max})) \cdot \sin \left(c \cdot \frac{\pi}{12} \cdot t \right) \quad (25)$$

で与えられる。ここで、 $I(t)_{max}$ は時刻 t までの内部状態の最大値を表しており

$$I(t)_{max} = \max \{ I(t), I(t-1)_{max} \} \quad (26)$$

で与えられる。また、 $I(t)$ は時刻 t における文脈情報部のニューロンの不応性の項を除いた内部状態の絶対値の平均値である。 M 個の層から構成されるカオス四元数多方向連想メモリにおいて x 層に入力が与えられたとき、 $I(t)$ は

$$I(t) = \frac{1}{N^x - n^x} \times \sum_{j=n^x+1}^{N^x} \left| \sum_{y \neq x}^M \left(\sum_{k=1}^{n^y} \mathbf{w}_{jk}^{xy} \sum_{d=0}^t k_m^d \mathbf{x}_k^y(t-d) \right) \right| \quad (27)$$

で与えられる。ここで、 N^x は x 層のニューロン数、 n^x は x 層のキー入力部のニューロン数、 n^y は y 層のキー入力部のニューロン数、 \mathbf{w}_{jk}^{xy} は y 層のニューロン k から x 層のニューロン j への重み、 k_m は時間減衰定数、 $\mathbf{x}_k^y(t)$ は時刻 t における y 層のニューロン k の出力を表している。また、不応性のスケールリングファクタのパラメータである $a(I(t)_{max})$, $b(a(I(t)_{max}))$ は

$$a(I(t)_{max}) = \begin{cases} 0.0801I(t)_{max} + 0.0168 & (15 \leq I(t)_{max}) \\ 1.2(I(t)_{max} < 15) \end{cases} \quad (28)$$

$$b(a(I(t)_{max})) = \begin{cases} 0.0745a(I(t)_{max})^3 \\ -0.556a(I(t)_{max})^2 \\ +2.1661a(I(t)_{max}) - 0.7553 & (1.2 < a(I(t)_{max})) \\ 1.2 & (a(I(t)_{max}) \leq 1.2) \end{cases} \quad (29)$$

のように決定する。

Step 4 : 繰り返し

Step 2, 3 を繰り返す。

M 個の層から構成されるカオス四元数多方向連想メモリにおいて x 層に入力が与えられた場合、**Step 2** において y 層 ($y \neq x$) のキー入力部のニューロン k の時刻 t における出力 $\mathbf{x}_k^y(t)$ は

$$\mathbf{x}_k^y(t) = f \left(\sum_{j=1}^{N^x} \mathbf{w}_{kj}^{yx} \mathbf{x}_j^x(t) \right) \quad (30)$$

で与えられる。ここで、 N^x は x 層のニューロン数、 \mathbf{w}_{kj}^{yx} は x 層のニューロン j から y 層のニューロン k への重み、 $\mathbf{x}_j^x(t)$ は x 層のニューロン j の時刻 t における出力を表す。

また、**Step 3** において、 x 層のキー入力部のニューロン j の時刻 $t+1$ における出力 $\mathbf{x}_j^x(t+1)$ は

$$\mathbf{x}_j^x(t+1) = f \left(\sum_{y \neq x}^M \left(\sum_{k=1}^{n^y} \mathbf{w}_{jk}^{xy} \mathbf{x}_k^y(t) \right) + \mathbf{v} \mathbf{A}_j^x \right) \quad (31)$$

で与えられる。ここで、 n^y は y 層のキー入力部のニューロン数、 \mathbf{w}_{jk}^{xy} は y 層のニューロン k から x 層のニューロン j への重み、 \mathbf{A}_j^x は x 層のニューロン j への外部入力を表す。また、 x 層の文脈情報部のニューロン j の時刻 $t+1$ における出力 $\mathbf{x}_j^x(t+1)$ は

$$\mathbf{x}_j^x(t+1) = f \left(\sum_{y \neq x}^M \left(\sum_{k=1}^{n^y} \mathbf{w}_{jk}^{xy} \sum_{d=0}^t k_m^d \mathbf{x}_k^y(t-d) \right) - \alpha(t, I(t)_{max}) \sum_{d=0}^t k_r^d \mathbf{x}_j^x(t-d) \right) \quad (32)$$

で与えられる。ここで、 n^y は y 層のキー入力部のニューロン数、 \mathbf{w}_{jk}^{xy} は y 層のニューロン k から x 層のニューロン j への重みである。

3.4 外部入力

カオス四元数多方向連想メモリでは、パターンが入力された層の文脈情報部の状態がカオスによって変化するとその影響は他の層へと伝搬し、さらにはパターンが入力された層の全体に及ぶ。そのため、記憶パターンの数が多くなると想起の過程においてキー入力部のパターンが他のキーパターンに遷移してしまう可能性が高くなる。カオス多方向連想メモリ¹⁵⁾ やカオス複素多方向連想メモリ²⁵⁾ では、他のキーパターンへの遷移を防ぐ方法として、パターンが入力された層のキー入力部のニューロンに外部入力を与え続けるという方法を用いている。カオス四元数多方向連想メモリでも、

同様にパターンが入力された層に対して外部入力を与え続ける方法を用いている。

x 層に入力が与えられた場合、初期入力にノイズが含まれていないことが明らかであれば、外部入力を $\mathbf{A}_j^x = \mathbf{x}_j^x(0)$ としても構わない。しかしながら、実際には入力パターンにノイズが含まれている可能性を考慮する必要があるため、ネットワークの出力が最初に安定したとき、つまり

$$t_{in} = \min \left\{ t \left| \sum_{j=1}^{n^x} (\hat{\mathbf{x}}_j^x(t) - \hat{\mathbf{x}}_j^x(t-1)) = 0 \right. \right\} \quad (33)$$

で与えられる時刻 t_{in} における x 層のキー入力部の量子化した出力の値 $\hat{\mathbf{x}}_j^x(t_{in})$ を正しいキー入力のパターンであるとみなして、外部入力として用いる。ここで、 n^x は x 層のキー入力部のニューロン数を表す。

また、 $\hat{\mathbf{x}}_j^x(t)$ は x 層のニューロン j の時刻 t における量子化した出力である。本研究では学習パターンとして実部と3つの虚部に対して ± 1 を割り当てた16値パターンを用いているため、 x 層のニューロン j の時刻 t における量子化した出力 $\hat{\mathbf{x}}_j^x(t)$ は

$$\hat{\mathbf{x}}_j^x(t) = g(\mathbf{x}_j^x(t)) \quad (34)$$

で与えられる。ここで、 $g(\cdot)$ は

$$g(\mathbf{x}) = g^{(e)}(x^{(e)}) + g^{(i)}(x^{(i)})\mathbf{i} + g^{(j)}(x^{(j)})\mathbf{j} + g^{(k)}(x^{(k)})\mathbf{k} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} g^{(e)}(u) &= g^{(i)}(u) = g^{(j)}(u) = g^{(k)}(u) \\ &= \begin{cases} 1 & (0 \leq u) \\ -1 & (u < 0) \end{cases} \end{aligned} \quad (36)$$

で与えられる。

4 計算機実験

ここでは、提案するパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリの動作を確認し、有効性を示すために計算機実験を行った。この実験では、1対 N の関係にあるパターンの組を学習させ、共通項を入力として与えたときに想起される N 個のパターンのうち、いくつパターンが時刻 $t = 0 \sim 999$ の間に想起できたのかをそれぞれのモデルについて調べている。なお、以下の実験はすべて10回の試行の平均である。

4.1 提案モデルの1対多の想起能力

ここでは、提案モデルと手動でパラメータを調整したカオス四元数多方向連想メモリ²⁰⁾、従来のパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリ²²⁾における想起能力の比較を行った。

3~6層のネットワークにおいて、提案モデル (Proposed Model) と手動でパラメータを調整したカオス四元数多方向連想メモリ (Adjusted Model)、従来のパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリ (Conventional Model) の想起能力の比較を行った結果を Fig.2 に示す。

いずれのネットワークにおいても、パターン数 N が3~7では1.0に近い想起率が得られているが、 N が大きくなると想起率が低下している。その傾向は、どのモデルでも似たようなものとなっているが、従来のパ

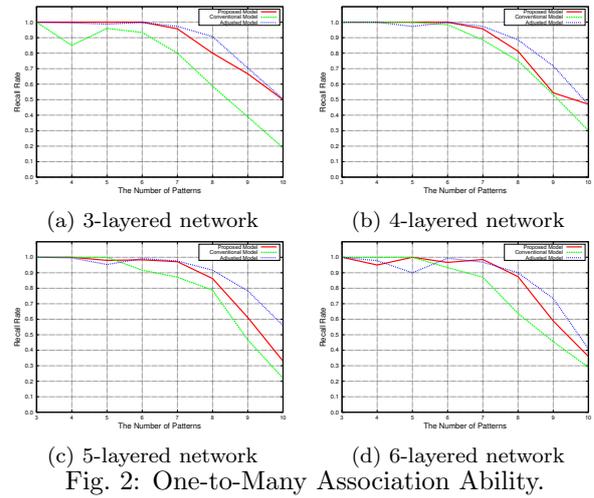


Fig. 2: One-to-Many Association Ability.

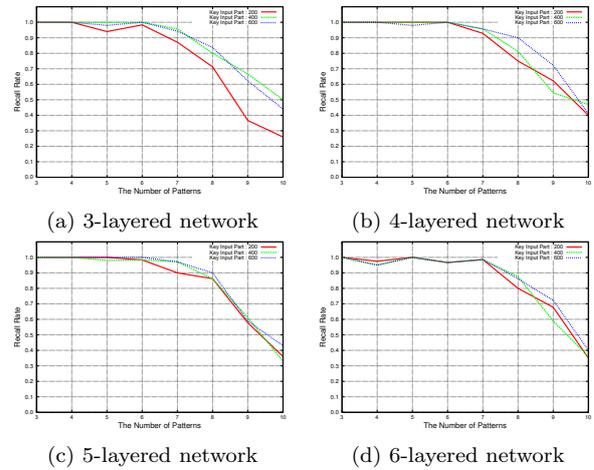


Fig. 3: Recall Rate in Various Size Network (Key Input Part) (1).

ラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリの想起率と比べると、提案モデルの想起率の方が高くなっていることがわかる。

4.2 ニューロン数の違いによる想起能力の変化

提案モデルにおけるパラメータの自動調整の方法を決定する際には、3~6層のキー入力部のニューロン数が400、文脈情報部のニューロン数が100のネットワークを用いている。ここでは、提案モデルにおいて、ニューロン数を変更したときに1対多の想起能力がどのように変化するかを調べる実験を行った。

4.2.1 キー入力部のニューロン数による違い

ここでは、キー入力部のニューロン数が200, 400, 600の提案モデルにおける想起率を調べる実験を行った。なお、いずれの場合も文脈情報部のニューロン数は100としている。

Fig.3, 4にキー入力部のニューロン数による違いによる想起率の変化を調べた結果を示す。Fig.3より、いずれのネットワークにおいてもキー入力部のニューロン数に関わらず、同程度の想起率が得られていることがわかる。また、Fig.4より、キー入力部のニューロン数が同じ場合には、想起率は層の数による大きな違いがないことがわかる。

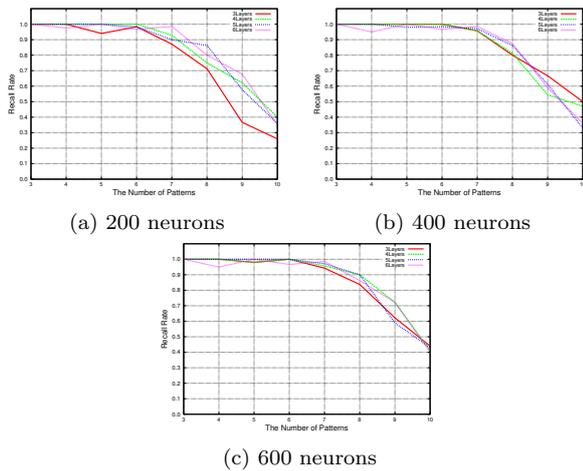


Fig. 4: Recall Rate in Various Size Network (Key Input Part) (2).

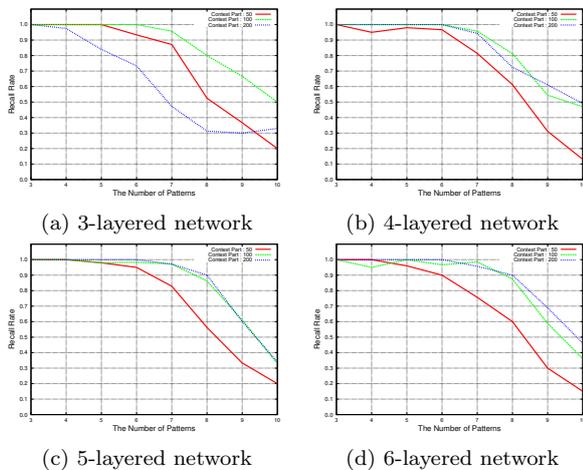


Fig. 5: Recall Rate in Various Size Network (Context Part) (1)

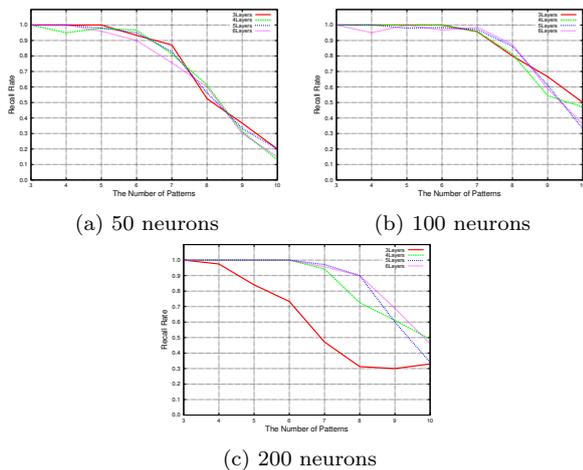


Fig. 6: Recall Rate in Various Size Network (Context Part) (2).

以上の結果より、キー入力部のニューロン数に関わらず、提案モデルにおいてパラメータの自動調整が行えていることがわかる。

4.2.2 文脈情報部のニューロン数による違い

ここでは、文脈情報部のニューロン数が 50, 100, 200 の提案モデルにおける想起率を調べる実験を行った。なお、いずれの場合もキー入力部のニューロン数は 400 としている。

Fig.5, 6 に文脈情報部のニューロン数による違いによる想起率の変化を調べた結果を示す。Fig.5 より、3 層の文脈情報部のニューロン数が 50 の場合の想起率が文脈情報部のニューロン数が 100 と 200 の場合と比べるとほとんどの層で低くなってしまっているものの、文脈情報部のニューロン数が 100 と 200 の場合の想起率は同程度になっていることがわかる。また、Fig.6 より、Fig.5 の場合と同様に、文脈情報部のニューロン数が 200 のときの 3 層の場合の想起率が、他の層の想起率と比べると多少低くなっているものの、文脈情報部のニューロン数が同じ場合の想起率には層の数による大きな違いがないことがわかる。

以上の結果より、文脈情報部のニューロン数に関わらず、提案モデルにおいてパラメータの自動調整が行えていることがわかる。

4.3 層の数の違いによる想起能力の変化

提案モデルにおけるパラメータの自動調整の方法を決定する際には、3~6 層のキー入力部のニューロン数が 400、文脈情報部のニューロン数が 100 のネットワークを用いている。ここでは、提案モデルにおいて、層の数を変更したときに 1 対多の想起能力がどのように変化するか調べる実験を行った。

7~10 層のネットワークにおいて、提案モデルと手動でパラメータを調整したカオス四元数多方向連想メモリの想起能力の比較を行った結果を Fig.7 に示す。

Fig.7 を見ると、3~6 層の場合と同程度の想起率が 7~10 層のネットワークにおいて得られており、パラメータの自動調整方法の変更前のカオス四元数多方向連想メモリの想起率と比べても、提案モデルの想起率が高くなっていることがわかる。

以上の結果より、層の数を増やしても提案モデルにおいてパラメータの自動調整が行えていることがわかる。

4.3.1 キー入力部のニューロン数による違い

ここでは、3~6 層の場合と同様に 7~10 層でのキー入力部のニューロン数が 200, 400, 600 の提案モデルにおける想起率を調べる実験を行った。なお、いずれの場合も文脈情報部のニューロン数は 100 としている。

Fig.8, 9 にキー入力部のニューロン数による違いによる想起率の変化を調べた結果を示す。Fig.8 より、10 層のキー入力部のニューロン数が 600 の場合の想起率が低くなっているものの、それ以外の場合のキー入力部のニューロン数に関わらず、同程度の想起率が得られていることがわかる。また Fig.9 より、Fig.8 の場合と同様に、キー入力部のニューロン数が 600 のときの 10 層の場合の想起率が低くなっているものの、キー入力部のニューロン数が同じ場合に、想起率には層の数による大きな違いはないことがわかる。

以上の結果より、キー入力部のニューロン数に関わらず、層の数を増やしても提案モデルにおいてパラメータの自動調整が行えていることがわかる。

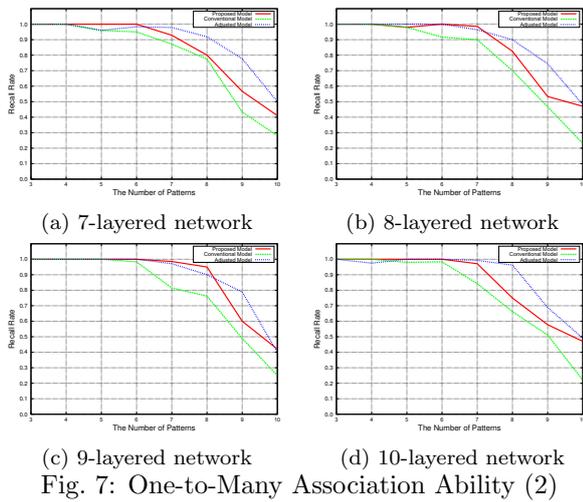


Fig. 7: One-to-Many Association Ability (2)

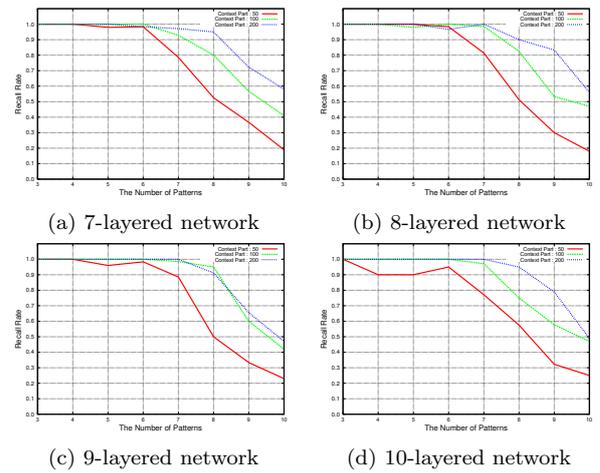


Fig. 10: Recall Rate in Various Size Network (Context Part) (3)

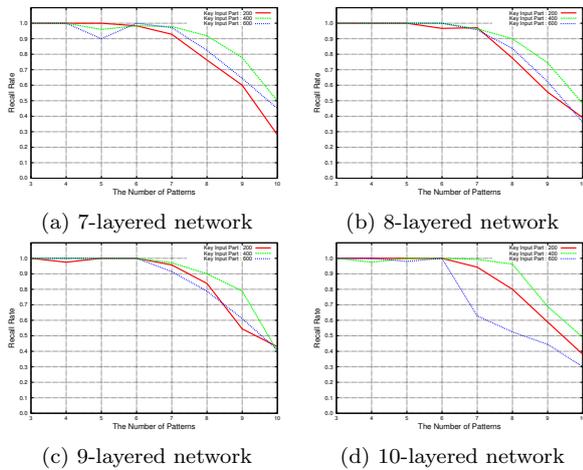


Fig. 8: Recall Rate in Various Size Network (Key Input Part) (3)

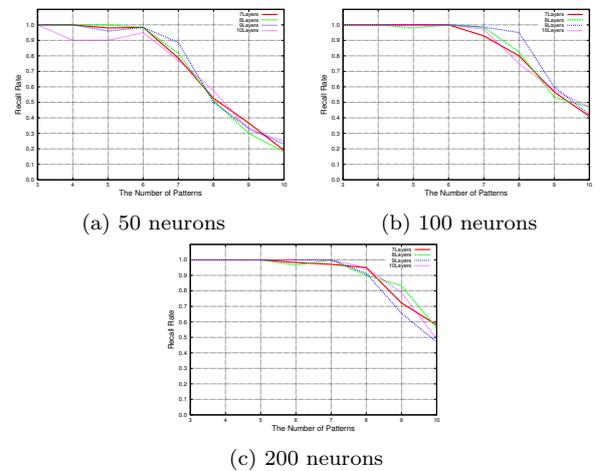


Fig. 11: Recall Rate in Various Size Network (Context Part) (4)

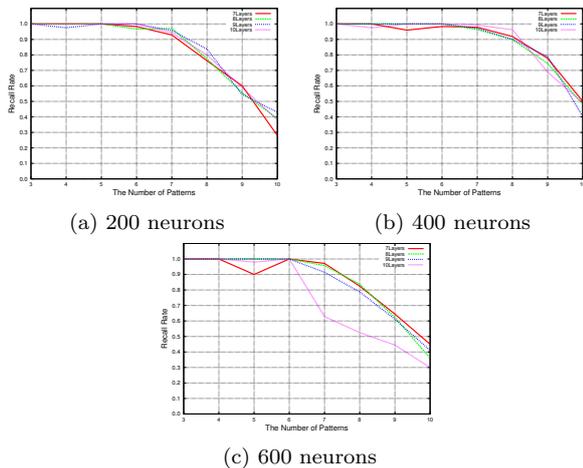


Fig. 9: Recall Rate in Various Size Network (Key Input Part) (4)

4.3.2 文脈情報部のニューロン数による違い

ここでは、3~6層の場合と同様に7~10層での文脈情報部のニューロン数が50, 100, 200の提案モデルにおける想起率を調べる実験を行った。なお、いずれの場合もキー入力部のニューロン数は400としている。

Fig.10, 11 に文脈情報部のニューロン数による違い

による想起率の変化を調べた結果を示す。Fig.10 より、どの層でも文脈情報部のニューロン数が50の時の想起率が他の場合と比べて低くなっているものの、大きな差はなく同程度の想起率が得られていることがわかる。また Fig.11 より、文脈情報部のニューロン数が同じ場合に、想起率には層の数による大きな違いはないことがわかる。

5 おわりに

本論文では、カオス四元数多方向連想メモリ²⁰⁾において、その時刻までの内部状態の最大値に応じて不応性のスケーリングファクタの値を調整する方法を提案した。このモデルは、カオス四元数多方向連想メモリに基づくモデルであり、不応性のスケーリングファクタの取り得る範囲を決定するパラメータ a と b を内部状態の値に応じて自動調整することができる。なお、提案モデルにおいて、 a, b を決定する方法については、カオス四元数多方向連想メモリにおいて、様々な a, b の組み合わせに対して実験を行い、高い想起率が得られる a, b の組み合わせにおける内部状態の値と a, b との関係に基づいて決定した。

提案するパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリにおいて、以下のような性質があ

ることを確認した。

- (1) その時刻までの内部状態の最大値に基づいて、パラメータの自動調整を行うことができる。
- (2) 手動でパラメータの調整を行ったカオス四元数多方向連想メモリ²⁰⁾と同程度の想起能力をもつ。
- (3) 従来のパラメータの自動調整が可能なカオス四元数多方向連想メモリ²²⁾よりも優れた想起能力をもつ。
- (4) パターン数が大きくなると、想起率は低下する。
- (5) 層の数に関係なくパラメータの自動調整が行える。
- (6) キー入力部、文脈情報部のニューロン数を変化させても、パラメータの自動調整が行える。

なお、提案モデルでは、不応性の項の時間減衰定数 k_r 、や相互結合の項の時間減衰定数 k_m はネットワークのサイズに関係なく、一定の値を用いている。これらの値も自動的に調整できるようにすることで、より高い想起率が得られるような自動調整が可能になると考えられる。

参考文献

- 1) K. Nakano : “Associatron – a model of associative memory,” IEEE Transactions on Systems Man and Cybernetics, Vol.2, No.1, pp.380–388, 1972.
- 2) J. J. Hopfield : “Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities,” Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, Vol.79, pp.2554–2558, 1982.
- 3) B. Kosko : “Bidirectional associative memories,” IEEE Transactions on Systems Man and Cybernetics, Vol.18, No.1, pp.49–60, 1988.
- 4) M. Hagiwara : “Multidirectional associative memory,” Proceedings of IEEE and INNS International Joint Conference on Neural Networks, Washington D.C., Vol.1, pp.3–6, 1990.
- 5) M. Hattori and M. Hagiwara : “Episodic associative memory,” Neurocomputing, Vol.12, pp.1–18, 1996.
- 6) 根本 幾, 河野 知志 : “神経回路網の複素数値化の試み,” 電子情報通信学会論文誌 D-II, Vol.J74, No.9, pp.1282–1288, 1991.
- 7) 橋本 直樹, 黒江 康明, 森 武宏 : “複素ニューラルネットワークに対するエネルギー関数について,” 電子情報通信学会技術報告, No.NC98-152, pp.121–128, 1999.
- 8) T. Isokawa, H. Nishimura, N. Kamiura and N. Matsui : “Fundamental properties of quaternionic Hopfield neural network,” International Journal of Neural Systems, Vol.18, No.2, pp.135–145, 2008.
- 9) 青木 宏之, 小林 幸夫 : “ペナルティ項を有する複素連想記憶モデルの性質,” 電子情報通信学会論文誌 A, Vol.J81, No.11, pp.1538–1546, 1998.
- 10) 青木 宏之 : “複素数体上に拡張したホップフィールド連想記憶の平衡状態の解析,” 電子情報通信学会論文誌 A, Vol.J78, No.9, pp.1238–1241, 1995.
- 11) S. Jankowski, A. Lozowski and J. M. Zurada : “Complex-valued multistate neural associative memory,” IEEE Transactions on Neural Networks, Vol.7, No.6, pp.1491–1496, 1996.
- 12) 黒江 康明 : “複素連想記憶のモデルとそのダイナミクス,” 電子情報通信学会学会誌, Vol.87, No.6, pp.454–459, 2004.
- 13) 合原 一幸編 : カオス –カオス理論の基礎と応用–, サイエンス社, 1990.
- 14) K. Aihara, T. Takabe and M. Toyoda : “Chaotic neural networks,” Physics Letter A, Vol.144, No.6 & 7, pp.333–340, 1990.
- 15) Y. Osana and M. Hagiwara : “Separation of superimposed pattern and many-to-many associations by chaotic neural networks,” Proceedings of IEEE and INNS International Joint Conference on Neural Networks, Anchorage, Vol.1, pp.514–519, 1998.
- 16) 長名優子, 服部元信, 萩原 将文 : “カオス双方向連想メモリ,” 電気学会論文誌 C, Vol.116, No.7, pp.741–747, 1996.
- 17) M. Nakada and Y. Osana : “Chaotic complex-valued associative memory,” Proceedings of International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Vancouver, 2007.
- 18) 中田正雄, 長名優子 : “カオス複素連想メモリによる多値パターンの動的想起の実現,” 知能と情報, Vol.20, No.3, pp.423–432, 2008.
- 19) Y. Osana : “Chaotic quaternionic associative memory,” Proceedings of IEEE and INNS International Joint Conference on Neural Networks, Brisbane, 2012.
- 20) T. Okutsu and Y. Osana : “Chaotic quaternionic multidirectional associative memory,” Proceedings of International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Luzern, 2014.
- 21) 河野隼士, 奥津拓海, 長名優子 : “カオス四元数多方向連想メモリにおける1対多の想起能力の検討,” 計測自動制御学会 システム・情報部門学術講演会, 2014.
- 22) R. Ito and Y. Osana : “Chaotic quaternionic multidirectional associative memory with adaptive scaling factor of refractoriness,” Proceedings of International workshop on Nonlinear Dynamics of Electronic Systems, Como, 2015.
- 23) N. Hayashi and Y. Osana : “Chaotic multidirectional associative memory with adaptive scaling factor of refractoriness,” Proceedings of International Joint Conference on Neural Networks, Killarney, 2015.
- 24) Y. Osana, M. Hattori and M. Hagiwara : “Chaotic multidirectional associative memory,” Proceedings of International Conference on Neural Networks, Houston, 1997.
- 25) Y. Shimizu and Y. Osana : “Chaotic complex-valued multidirectional associative memory,” Proceedings of IASTED Artificial Intelligence and Applications, Innsbruck, 2010.
- 26) A. Yoshida and Y. Osana : “One-to-many association ability of chaotic complex-valued multidirectional associative memory,” Proceedings of International Symposium on Nonlinear Theory and its Applications, Kobe, 2011.

ホップフィールド型八元数ニューラルネットワークのモデルとエネルギー関数の存在条件

○黒江康明 飯間等 (京都工芸繊維大学)

Models of Hopfield-Type Octonion Neural Networks and Existing Conditions of Energy Functions

*Y. Kuroe and H. Iima (Kyoto Institute of Technology)

Abstract— Recently, models of neural networks in the real domain have been extended into the high dimensional domain such as the complex number and quaternion domain, and several high-dimensional models have been proposed. These extensions are generalized by introducing Clifford algebra (geometric algebra). In this paper we extend conventional real-valued Hopfield-type neural networks into the octonion domain and discuss their dynamics. The octonions represent a particular extension of the quaternions which also represent a particular extension of the complex numbers and have 7 imaginary parts. They are non-commutative and non-associative on multiplication and do not belong to Clifford algebra due to the latter fact. With this in mind we propose four models of octonion-valued Hopfield-type neural networks. We derive existence conditions of an energy function and construct energy function for each model.

Key Words: Hopfield-type neural network, Octonion, Energy function, Existence condition

1 はじめに

近年、複素数(複素信号)を扱う事ができる複素数値化されたニューラルネットワーク(以後 NN)のモデルがいくつか提案され、その情報処理能力、学習法や応用などに関する研究が盛んに行われている^{1,2)}。また最近では、さらに高次元化された四元数を用いた NN のモデルも提案され、活発に研究が行われている^{2,12)}。これら高次元の表現は、クリフォード代数(Clifford algebra)(幾何代数(Geometric Algebra)とも呼ばれる)^{4,5,6)}を用いた表現として一般化される³⁾。

良く知られているように NN の研究は大きく、階層型 NN に対するものとリカレント NN に対するものに大別される。そのうちリカレント NN は、ネットワークのダイナミックスを利用することになるので、ダイナミックスを調べるのが中心的な課題となっている。その中にエネルギー関数の存在および構成の問題がある。Hopfield は、あるクラスのリカレント NN(Hopfield 型 NN と呼ばれる)に対し、エネルギー関数が存在するための条件を示すとともに、実際にエネルギー関数を構築した⁷⁾。またさらに、エネルギー関数を利用して NN により最適化問題を解く方法を提案し、実際に巡回セールスマン問題などの最適化問題が解けることを示した^{8,9)}。これらの研究は脳を模倣した NN で実際に最適化問題を解けることを示したのものとして、各方面に大きなインパクトを与えた。その後、エネルギー関数を用いた NN の定性的な性質の解析やその結果を利用したさまざまな応用、たとえば連想記憶の設計への応用、各種の最適化問題の応用など非常に活発に研究されてきた。

筆者らは既に、複素数で表される Hopfield 型 NN のモデルを提案し、そのエネルギー関数の存在条件を導くとともに、実際にエネルギー関数を構成した^{10,11)}。またこの研究を四元数に拡張した。四元数は積に関して可換でないことにより、Hopfield 型 NN のモデルを 3 種類提案し、それぞれにエネルギー関数の存在条件を導くとともにエネルギー関数を構築した¹²⁾。これらの研究をさらに、dual number および hyperbolic number に拡張

するとともに¹³⁾、複素数, dual number, hyperbolic number および四元数に関するこれまでの研究がクリフォード代数として再構築できることを示した¹⁴⁾。

本論文の目的は、これらの研究を八元数に拡張することである。すなわち八元数で表される Hopfield 型 NN のモデルを示し、それに対しエネルギー関数の存在条件を導くとともに、実際にエネルギー関数を構成することである。八元数は、四元数が複素数を拡張したものであると同様、四元数を拡張したもので、1つの実数部と7つの虚数部を持つ数体系である。近年、八元数は、主として幾何学や物理学における応用の研究が多くなされるようになり^{15,16,17)}、高次元の情報処理を可能とするものとして非常に期待されている。八元数は積に関して可換でなく、また結合則も満たさない。また、後者の性質のためクリフォード代数には属さない。本稿では、八元数のこれらの性質を考慮して、八元数の Hopfield 型 NN のモデルを 4 種類提案する。またそれらのモデルに対しそれぞれエネルギー関数の存在条件を導くとともに実際にエネルギー関数を構成する。

2 八元数

ここでは八元数について本稿で必要とする事項について述べる。八元数は、複素数, 四元数を拡張した数体系で、次の 8 つの基底をもつ 8 次元の代数でこれを本稿では \mathbb{O} と表す。

$$\{1, \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_5, \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_7\}$$

従って八元数 $x \in \mathbb{O}$ は次のように表される。

$$x = x^{(0)} + \mathbf{e}_1 x^{(1)} + \mathbf{e}_2 x^{(2)} + \mathbf{e}_3 x^{(3)} + \mathbf{e}_4 x^{(4)} + \mathbf{e}_5 x^{(5)} + \mathbf{e}_6 x^{(6)} + \mathbf{e}_7 x^{(7)} \quad (1)$$

ここで $x^{(0)}, x^{(1)}, x^{(2)}, x^{(3)}, x^{(4)}, x^{(5)}, x^{(6)}, x^{(7)}$ は実数である。ただし、これらの基底の間の積は Table 1 に表されるような規則に従う。この表において、左端の列の基底 \mathbf{e}_i と上端の行の基底 \mathbf{e}_j の積 $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$ の結果がそれら

Table 1: Octonion multiplication table

	1	e ₁	e ₂	e ₃	e ₄	e ₅	e ₆	e ₇
1	1	e ₁	e ₂	e ₃	e ₄	e ₅	e ₆	e ₇
e ₁	e ₁	-1	e ₄	e ₇	-e ₂	e ₆	-e ₅	-e ₃
e ₂	e ₂	-e ₄	-1	e ₅	e ₁	-e ₃	e ₇	-e ₆
e ₃	e ₃	-e ₇	-e ₅	-1	e ₆	e ₂	-e ₄	e ₁
e ₄	e ₄	e ₂	-e ₁	-e ₆	-1	e ₇	e ₃	-e ₅
e ₅	e ₅	-e ₆	e ₃	-e ₂	-e ₇	-1	e ₁	e ₄
e ₆	e ₆	e ₅	-e ₇	e ₄	-e ₃	-e ₁	-1	e ₂
e ₇	e ₇	e ₃	e ₆	-e ₁	e ₅	-e ₄	-e ₂	-1

が交差する欄に書かれている¹⁵⁾. Table 1 より, 八元数は $i \neq j$ なる i と j に関し

$$\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j = -\mathbf{e}_j \mathbf{e}_i \neq \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i$$

が成り立ち, 積に関して非可換であることがわかる. また, $i \neq j \neq k$ なる i と j と k に関して

$$(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_k = -\mathbf{e}_i (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_k) \neq \mathbf{e}_i (\mathbf{e}_j \mathbf{e}_k)$$

が成り立ち, 3つの八元数の積に関して結合則が成り立たないことがわかる. 結合則が成り立たないことより, 八元数は Clifford 代数には属さない.

(1) 式で表される八元数の x の第一項 $x^{(0)}$ は, x の実数部と呼ばれ, $Re(x)$ と表される. 実数部が零の八元数は純八元数 (pure octonion) とよばれる. またある八元数 x の共役八元数 x^* は, 複素数, 四元数と同様次のように定義される.

$$x^* = x^{(0)} - \mathbf{e}_1 x^{(1)} - \mathbf{e}_2 x^{(2)} - \mathbf{e}_3 x^{(3)} - \mathbf{e}_4 x^{(4)} - \mathbf{e}_5 x^{(5)} - \mathbf{e}_6 x^{(6)} - \mathbf{e}_7 x^{(7)} \quad (2)$$

これを用いて, 八元数 x の絶対値 $|x|$ は次のように定義される.

$$|x|^2 = x^* x = \sum_{i=0}^7 x^{(i)^2} \quad (3)$$

3 ホップフィールド型八元数ニューラルネットワークのモデル

本章では, 八元数で表現されたりカレント NN のモデルを示す. 特に, 実数の連続時間 Hopfield 型 NN のモデルを八元数表現に拡張したものを4種類示す.

1つ目のモデルは, 以下のような微分方程式で表されるモデルであり, Hopfield が実数のモデルとして提案した NN モデルの自然な拡張となっている.

• Model 1

$$\tau_i \frac{du_i}{dt} = -u_i + \sum_{j=1}^n w_{ij} v_j + b_i \quad (4)$$

$$v_i = f(u_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

ここで, n はネットワークを構成するニューロンの個数, u_i , v_i はそれぞれ, 時刻 t における i 番目のニューロンの状態と出力, b_i は i 番目のニューロンのしきい

値, w_{ij} は j 番目のニューロンから i 番目のニューロンへの結合重み係数, τ_i は i 番目のニューロンの時定数である. このモデルにおいて, u_i, v_i, b_i, w_{ij} はすべて八元数, すなわち $u_i \in \mathbb{O}, v_i \in \mathbb{O}, b_i \in \mathbb{O}, w_{ij} \in \mathbb{O}$ である. 時定数 τ_i のみ正の実数, すなわち $\tau_i \in \mathbb{R}, \tau_i > 0$ とする. $f(\cdot)$ はニューロンの活性化関数であり, $\mathbb{O} \rightarrow \mathbb{O}$ なる非線形関数である. また時間微分 du_i/dt は, u_i の各要素ごとの時間微分, すなわち

$$\frac{d}{dt} u_i(t) := \sum_{i=0}^7 \frac{d}{dt} u^{(i)}(t) \mathbf{e}_i$$

と定義している. ただし, $\mathbf{e}_0 = 1$ である.

八元数 \mathbb{O} の積は可換でないので, 結合重み係数とニューロンの出力との積 $w_{ij} v_j$ の順序を逆, すなわち $v_j w_{ij}$ としたモデルは (4) と異なるモデルとなる. したがって, 二つ目のモデルとして, 次の微分方程式で表されるモデルを考える.

• Model 2

$$\tau_i \frac{du_i}{dt} = -u_i + \sum_{j=1}^n v_j w_{ij} + b_i \quad (5)$$

$$v_i = f(u_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

クリフォード代数においては多くの場合, ある数の幾何学的変換が別の数を右と左から乗ずるというサンドイッチ表現になることが多い¹. これより, ニューロンの出力 v_j に異なる二つの八元数結合重み係数を左と右から乗じたモデルが考えられる. すなわち左から乗ずる結合重み係数を w_{ij}^l とし, 右から乗ずる結合重み係数を w_{ij}^r とし, これらを乗じたもの $w_{ij}^l v_j w_{ij}^r$ を, (4) 式のモデルの $w_{ij} v_j$ と置き換えたモデルが考えられる. ただし先に述べたように, 八元数は3つの数の積に関して結合則が成り立たないので, $w_{ij}^l (v_j w_{ij}^r)$ と $(w_{ij}^l v_j) w_{ij}^r$ は異なり, 次の二つのモデルが考えられる.

• Model 3

$$\tau_i \frac{du_i}{dt} = -u_i + \sum_{j=1}^n w_{ij}^l (v_j w_{ij}^r) + b_i \quad (6)$$

$$v_i = f(u_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

¹たとえば四元数においては一般に, 四元数 v の回転変換はある四元数 w とその共役四元数 w^* を両側から乗じたもの, すなわち $w^* v w$ として表される.

$$\tau_i \frac{du_i}{dt} = -u_i + \sum_{j=1}^n (w_{ij}^\ell v_j) w_{ij}^r + b_i \quad (7)$$

$$v_i = f(u_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

4 エネルギー関数の定義

Hopfield 等は (4) 式を実数の NN とした場合、すなわち u_i, v_i, b_i, w_{ij} をすべて $u_i \in \mathbb{R}, v_i \in \mathbb{R}, b_i \in \mathbb{R}, w_{ij} \in \mathbb{R}$ とし、活性化関数 f を $f: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ とした場合のモデルを対象として、エネルギー関数が存在するための条件とエネルギー関数を示した⁷⁾。すなわち、 $E(\mathbf{x}): \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ なるある関数をエネルギー関数として定義し、次のようなことを示した。(4) 式のモデルが実数のモデルである場合、重み行列 $W = \{w_{ij}\}$ が対称行列 $W^T = W$ でかつ活性化関数 $f(\cdot)$ が連続微分可能で有界かつ単調増加ならば、NN はエネルギー関数を持つ。また、次の関数を実数の (4) 式の NN のエネルギー関数として提案した。

$$E(\mathbf{v}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n w_{ij} v_i v_j - \sum_{i=1}^n b_i v_i + \sum_{i=1}^n \int_0^{v_i} f^{-1}(\rho) d\rho \quad (8)$$

ここで $\mathbf{v} = [v_1, v_2, \dots, v_n]^T \in \mathbb{R}^n$ であり、 f^{-1} は f の逆関数である。(4) 式の NN がエネルギー関数の存在条件を満たすと、その NN はエネルギー関数 $E(\mathbf{v})$ を持ち次の性質を持つ：(i) E の (4) 式の NN の解軌道に沿っての時間微分、これを $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(4)R}$ と表すと、 $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(4)R}$ は零より小さいか等しい、さらに、(ii) $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(4)R} = 0$ を満たすのは $\frac{dv_i}{dt} = 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$) が成り立つ時であり、またその時に限る。

実数の Hopfield 型 NN のエネルギー関数にならって、(4)、(5)、(6) および (7) 式の NN モデルに対しエネルギー関数を次のように定義する。

定義 1 次の条件を満足する関数 $E(\cdot)$ を、八元数ニューラルネットワーク (\mathcal{N}) のエネルギー関数と呼ぶ。ただし、(\mathcal{N}) は NN のモデルの式番号、すなわち (\mathcal{N}) = (4)、(\mathcal{N}) = (5)、(\mathcal{N}) = (6) あるいは (\mathcal{N}) = (7) とする。

- (i) 関数 $E(\cdot)$ は、八元数 \mathbb{O} から \mathbb{R} への下に有界な写像である。
- (ii) $E(\cdot)$ の NN の解軌道に沿った時間微分を $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(\mathcal{N})}$ と表すと、 $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(\mathcal{N})} \leq 0$ を満たす。また、その時間微分が 0 となるのはネットワークの平衡点においてのみである、すなわち $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(\mathcal{N})} = 0$ となるのは、 $\frac{dv_i}{dt} = 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$) が成り立つときであり、またそのときに限る。

5 八元数活性化関数

一般に、リカレント NN のダイナミクスを論ずるためにはまず、活性化関数 $f(\cdot)$ として、どのような性質を持つ関数を用いるかが問題となる。実数のニューラルネットワークでは、シグモイド関数のような滑ら

かで有界な非線形関数が通常用いられる。また、複素 NN においては活性化関数に有界性を課すと、滑らかな関数として正則な関数 (複素微分可能な関数) は選ぶことはできない。これは有界で複素平面全体で正則な関数は定数に限るというリュービルの定理による。このため文献 10) では、滑らかさとして正則性の代わりに、複素非線形関数の実数部および虚数部が、それぞれ実数部、虚数部に関して連続偏微分可能な関数を活性化関数として選び、エネルギー関数が存在する条件を導き、具体的にエネルギー関数を構成している。八元数は複素数を拡張したもので、本稿では、複素 NN の場合に倣って (4)、(5)、(6) および (7) 式のモデルに対し、活性化関数に複素 NN に対する条件と同様な条件を考えてエネルギー関数の存在条件を議論する。

ここで、 $f^{(i)}, i = 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7$ を $f^{(i)}: \mathbb{R}^8 \rightarrow \mathbb{R}$ なる実数値関数とすると、八元数活性化関数 $f(u): \mathbb{O} \rightarrow \mathbb{O}$ は次のようにあらわされる。

$$f(u) = f^{(0)}(u^{(0)}, u^{(1)}, \dots, u^{(7)}) + \sum_{i=1}^7 \mathbf{e}_i f^{(i)}(u^{(0)}, u^{(1)}, \dots, u^{(7)}) \quad (9)$$

ここで

$$u = u^{(0)} + \sum_{i=1}^7 \mathbf{e}_i u^{(i)} \quad (10)$$

である。活性化関数 $f(\cdot)$ に対し、次を仮定する。

- (i) $f^{(l)}(\cdot)$ は $u^{(m)}$ ($l, m = 0, 1, \dots, 7$) に関して連続偏微分可能である。
- (ii) $f(\cdot)$ は有界な関数である、すなわち $|f(\cdot)| \leq M$ を満たす $M > 0$ が存在する。

ここで、活性化関数 $f(\cdot)$ の u に関するヤコビ行列を $\mathbf{J}_f(u) = \{\alpha_{lm}(u)\} \in \mathbb{R}^{8 \times 8}$ と表すことにする。ただし、 α_{lm} は次のように定義される。

$$\alpha_{lm}(u) = \left. \frac{\partial f^{(l)}}{\partial u^{(m)}} \right|_u \quad (11)$$

6 エネルギー関数の存在条件

本節では (4)、(5)、(6) および (7) 式で表される八元数 Hopfield 型 NN に対しエネルギーの存在条件を導き、またそれぞれのエネルギー関数を示す。そのためまず準備となることを説明し、必要な補題を示す。

6.1 準備

(4)、(5)、(6) および (7) 式で表される八元数 NN の活性化関数 f に関し、次の仮定をおく。

仮定 1 活性化関数 $f(u)$ は以下を満足する。

- (i) f は 1 対 1 の関数である。
- (ii) 任意の $u \in \mathbb{O}$ に対し、 f のヤコビ行列 $\mathbf{J}_f(u)$ は対称行列である。
- (iii) 任意の $u \in \mathbb{O}$ に対し、 f のヤコビ行列 $\mathbf{J}_f(u)$ は正定値である。

仮定 1 の (i) と活性化関数 f の有界性により, f に逆関数が存在し, これを $g = f^{-1}$ とすると, g は $u = g(v)$ として次のように表すことができる.

$$g(v) = g^{(0)}(v^{(0)}, v^{(1)}, \dots, v^{(7)}) + \sum_{i=1}^7 \mathbf{e}_i g^{(i)}(v^{(0)}, v^{(1)}, \dots, v^{(7)}) \quad (12)$$

ここで $g^{(l)}: \mathbb{R}^8 \rightarrow \mathbb{R}$ ($l = 0, 1, \dots, 7$) である. 次の補題が成り立つ.

補題 1 もし f が仮定 1 を満足するならば, 次式を満足するスカラーの関数 $G(v): \mathbb{O} \rightarrow \mathbb{R}$ が存在する.

$$\frac{\partial G}{\partial v^{(l)}} = g^{(l)}(v^{(0)}, v^{(1)}, \dots, v^{(7)}), \quad l = 0, 1, \dots, 7 \quad (13)$$

この補題は, 次のように関数 G を定義し, これが (13) 式を満足することを示すことにより証明できる.

$$G(v) = \int_0^{v^{(0)}} g^{(0)}(\rho, 0, 0, 0, 0, 0, 0, 0) d\rho + \int_0^{v^{(1)}} g^{(1)}(v^{(0)}, \rho, 0, 0, 0, 0, 0, 0) d\rho + \dots + \int_0^{v^{(7)}} g^{(7)}(v^{(0)}, v^{(1)}, v^{(2)}, v^{(3)}, v^{(4)}, v^{(5)}, v^{(6)}, \rho) d\rho \quad (14)$$

以下では, この関数 G を用いて (4), (5), (6) および (7) 式で表される八元数 Hopfield 型 NN のエネルギー関数を構成する.

6.2 存在条件の導出

(4) 式で表される Model 1, および (5) 式で表される Model 2 に対し次の定理が成り立つ.

定理 1 (4) 式で表される Model 1, および (5) 式で表される Model 2 に対し, 結合重み係数 w_{ij} が

$$w_{ji} = w_{ij}^* \quad (i, j = 1, 2, \dots, n). \quad (15)$$

を満たし, また活性化関数 f が仮定 1 を満たすならば, Model 1 と Model 2 にはエネルギー関数が存在する. また Model 1 のエネルギー関数の 1 つは $\mathbf{v} = [v_1, v_2, \dots, v_n] \in \mathbb{O}^n$ とすると

$$E(\mathbf{v}) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{1}{2} \text{Re}(v_i^* w_{ij} v_j + 2b_i^* v_i) - G(v_i) \right\} \quad (16)$$

と表され, Model 2 のエネルギー関数の 1 つは

$$E(\mathbf{v}) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{1}{2} \text{Re}(v_i^* v_j w_{ij} + 2b_i^* v_i) - G(v_i) \right\} \quad (17)$$

と表される.

注意 1 八元数は結合則を満たさないため, たとえば Model 1 のエネルギー関数における $v_i^* w_{ij} v_j$ におい

て, $v_i^* (w_{ij} v_j) \neq (v_i^* w_{ij}) v_j$ であり, 積 $v_i^* w_{ij} v_j$ の順序を指定する必要がある. ところが, $\text{Re}(v_i^* (w_{ij} v_j)) = \text{Re}((v_i^* w_{ij}) v_j)$ が成り立つことが示すことができるので, (16) 式においてはこの積の順序を指定していない. Model 2 についても同様である.

証明

まず Model 1 に対し, (16) 式の関数がエネルギー関数の定義である定義 1 の条件を満たしていることを示すことにより, その存在性を証明する. まず, 八元数における勾配オペレータを次のように定義する.

$$\nabla_{v_i} = \frac{d}{dv_i^{(0)}} + \mathbf{e}_1 \frac{d}{dv_i^{(1)}} + \dots + \mathbf{e}_7 \frac{d}{dv_i^{(7)}} \quad (18)$$

$\hat{\mathbf{v}}_i = [v_i^{(0)}, v_i^{(1)}, \dots, v_i^{(7)}]^t \in \mathbb{R}^8$ とすると, 結合重み係数 w_{ij} に関する仮定 (15) 式より, (16) 式の関数 E の $\hat{\mathbf{v}}_i$ に関する勾配 $\nabla_{\hat{\mathbf{v}}_i} E(\mathbf{v})$ は次のように計算できる.

$$\begin{aligned} \nabla_{\hat{\mathbf{v}}_i} E(\mathbf{v}) &= -(-\hat{\mathbf{u}}_i + \sum_{j=1}^n \hat{\mathbf{W}}_{ij}^1 \hat{\mathbf{v}}_j + \hat{\mathbf{b}}_i) \\ &= -\tau_i \frac{d\hat{\mathbf{u}}_i}{dt} \end{aligned} \quad (19)$$

ここで $\hat{\mathbf{u}}_i = [u_i^{(0)}, u_i^{(1)}, \dots, u_i^{(7)}]^t \in \mathbb{R}^8$, $\hat{\mathbf{b}}_i = [b_i^{(0)}, b_i^{(1)}, \dots, b_i^{(7)}]^t \in \mathbb{R}^8$ であり, また

$$\hat{\mathbf{W}}_{ij}^1 = \begin{bmatrix} w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(7)} \\ w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(3)} \\ w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(6)} \\ w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(1)} \\ w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(5)} \\ w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(4)} \\ w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(2)} \\ w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(0)} \end{bmatrix}$$

である. 従って, (16) 式の関数の勾配 $\nabla_{v_i} E(\mathbf{v})$ は次のように得られる.

$$\begin{aligned} \nabla_{v_i} E(\mathbf{v}) &= -(-u_i + \sum_{j=1}^n w_{ij} v_j + b) \\ &= -\tau_i \frac{du_i}{dt} \end{aligned} \quad (20)$$

これより (16) 式の関数 E の, Model 1 の軌道に沿っての時間微分は次のように計算できる.

$$\begin{aligned} \frac{dE(\mathbf{v})}{dt} &= \sum_{i=1}^n \sum_{l=0}^7 \frac{dE}{dv_i^{(l)}} \frac{dv_i^{(l)}}{dt} \\ &= \text{Re} \left\{ \sum_{i=1}^n \nabla_{v_i} E(\mathbf{v})^* \frac{dv_i}{dt} \right\} \end{aligned} \quad (21)$$

(20) 式を上式の右辺に代入すると、次のようになる。

$$\begin{aligned}
\frac{dE(\mathbf{v})}{dt} &= - \sum_{i=1}^n \left(\frac{du_i^{(0)}}{dt} \tau_i \frac{dv_i^{(0)}}{dt} + \frac{du_i^{(1)}}{dt} \tau_i \frac{dv_i^{(1)}}{dt} + \dots \right. \\
&\quad \left. + \frac{du_i^{(7)}}{dt} \tau_i \frac{dv_i^{(7)}}{dt} \right) \\
&= - \sum_{i=1}^n \left(\left(\sum_{m=0}^7 \frac{dg^{(m)}(v_i)}{dv_i^{(m)}} \frac{dv_i^{(m)}}{dt} \right) \tau_i \frac{dv_i^{(0)}}{dt} + \right. \\
&\quad \left(\sum_{m=0}^7 \frac{dg^{(1)}(v_i)}{dv_i^{(m)}} \frac{dv_i^{(m)}}{dt} \right) \tau_i \frac{dv_i^{(1)}}{dt} \\
&\quad \left. + \dots + \left(\sum_{m=0}^7 \frac{dg^{(7)}(v_i)}{dv_i^{(m)}} \frac{dv_i^{(m)}}{dt} \right) \tau_i \frac{dv_i^{(7)}}{dt} \right) \\
&= - \sum_{i=1}^n \left(\frac{d\hat{v}_i}{dt} \right)^t \tau_i \mathbf{J}_g(v_i)^t \left(\frac{d\hat{v}_i}{dt} \right) \quad (22)
\end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{J}_g(v_i)$ は関数 $g(\cdot)$ の v_i に関するヤコビ行列である。すべての i と v_i ($i = 1, 2, \dots, n$) について、 $\tau_i > 0$ であり、また仮定 1 の (iii) より $\mathbf{J}_f(u_i)$ は正定値であることより $\mathbf{J}_g(v_i)$ は正定値である。従って、 $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(4)} \leq 0$ が成り立つ。さらに $\left. \frac{dE}{dt} \right|_{(4)} = 0$ が成り立つのは $\frac{d\hat{\mathbf{v}}}{dt} = 0$ ($\Leftrightarrow \frac{d\mathbf{v}}{dt} = 0$) が成り立つ時であり、その時に限る。したがって、(16) 式の関数 E はエネルギー関数の定義である定義 1 を満たす。

Model 2 の (17) 式の関数 E については以下のように証明できる。(17) 式の関数 E の \hat{v}_i に関する勾配 $\nabla_{\hat{v}_i} E(\mathbf{v})$ を計算すると、(19) 式における $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^1$ を、次式で定義される $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^2$ に置き換えたものが得られる。このことを用いて、Model 1 と同様に証明できる。

$$\hat{\mathbf{W}}_{ij}^2 = \begin{bmatrix} w_{ij}^{(0)} & -w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(7)} \\ w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(6)} \\ w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(6)} \\ w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(1)} \\ w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(5)} \\ w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(4)} \\ w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(2)} \\ w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(0)} \end{bmatrix}$$

(証明終)

(6) 式で表される Model 3、および (7) 式で表される Model 4 に対し次の定理が成り立つ。

定理 2 (6) 式で表される Model 3、および (7) 式で表される Model 4 に対し、結合重み係数 w_{ij}^l と w_{ij}^r が $w_{ij}^{l*} = w_{ij}^r$ を満たすとし、これをあらためて

$$w_{ij} := w_{ij}^{l*} = w_{ij}^r$$

とおく。 w_{ij} が (15) 式を満たし、また活性化関数 f が仮定 1 を満たすならば、Model 3 と Model 4 にはエネ

ルギー関数が存在する。また Model 3 のエネルギー関数の 1 つは

$$E(\mathbf{v}) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{1}{2} \text{Re}(v_i^* (w_{ij}^* (v_j w_{ij}))) + 2b_i^* v_i - G(v_i) \right\} \quad (23)$$

と表され、Model 4 のエネルギー関数の 1 つは

$$E(\mathbf{v}) = - \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \left\{ \frac{1}{2} \text{Re}(v_i^* ((w_{ij}^* v_j) w_{ij}) + 2b_i^* v_i - G(v_i) \right\} \quad (24)$$

と表される。

証明

定理 1 と同様に Model 3 の (23) 式の関数 E の \hat{v}_i に関する勾配 $\nabla_{\hat{v}_i} E(\mathbf{v})$ を計算すると、(19) 式における $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^1$ を、二つの行列の積 $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^3 \hat{\mathbf{W}}_{ij}^2$ に置き換えたものが得られる。ただし $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^3$ は以下のように表される行列である。

$$\hat{\mathbf{W}}_{ij}^3 = \begin{bmatrix} w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(7)} \\ -w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(3)} \\ -w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(6)} \\ -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(7)} & -w_{ij}^{(5)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(1)} \\ -w_{ij}^{(4)} & w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(1)} & -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(5)} \\ -w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(2)} & -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(4)} \\ -w_{ij}^{(6)} & w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(3)} & -w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(0)} & w_{ij}^{(2)} \\ -w_{ij}^{(7)} & w_{ij}^{(3)} & w_{ij}^{(6)} & -w_{ij}^{(1)} & w_{ij}^{(5)} & -w_{ij}^{(4)} & -w_{ij}^{(2)} & w_{ij}^{(0)} \end{bmatrix}$$

行列 $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^3$ と $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^2$ は、それらの積が交換可能であることが示すことができ、この事実を用いると、Model 1 と同様に証明することができる。また Model 4 に対しては、(24) 式の関数 E の \hat{v}_i に関する勾配 $\nabla_{\hat{v}_i} E(\mathbf{v})$ を計算すると、(19) 式における $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^1$ を、二つの行列の積 $\hat{\mathbf{W}}_{ij}^2 \hat{\mathbf{W}}_{ij}^3$ に置き換えたものが得られ、同様に証明することができる。

(証明終)

注意 2 一般に二つの八元数 $a \in \mathbb{O}$ と $b \in \mathbb{O}$ に対し、 $(b^* a) b = b^* (a b)$ が成立することを示すことができる。従って、(23) 式と (24) 式のエネルギー関数の右辺第 2 項に現れる $w_{ij}^* (v_j w_{ij})$ と $(w_{ij}^* v_j) w_{ij}$ は等しい、すなわち $w_{ij}^* (v_j w_{ij}) = (w_{ij}^* v_j) w_{ij}$ が成り立つ。従って、これらは同じエネルギー関数となっている。

以上、八元数 \mathbb{O} で表現された 4 種類の Hopfield 型 NN に対して、エネルギー関数が存在するための条件を示し、実際にエネルギー関数を構成した。これらの条件は、結合重み係数と活性化関数に対する条件となっ

ている。なお、仮定 1 を満足する活性化関数の例として次の関数がある。

$$f(u) = \frac{u}{1 + |u|} \quad (25)$$

$$f(u) = \tanh(u^{(0)}) + \mathbf{e}_1 \tanh(u^{(1)}) + \dots + \mathbf{e}_7 \tanh(u^{(7)}) \quad (26)$$

これらの関数は、複素 NN や四元数 NN で活性化関数としてよく用いられる関数である。

7 おわりに

近年、実数で表されたニューラルネットワークのモデルを複素数あるいは四元数などに高次元化するモデルが提案され、その応用に関する研究が盛んに行われている。これらの高次元化はクリフォード代数表現を用いて一般化できる。本稿では、実数で表された Hopfield 型 NN を八元数に拡張したモデルを提案し、そのダイナミクスとくにエネルギー関数の存在条件について議論した。八元数は複素数や四元数を拡張した代数であるが、積についての結合則を満たさないためクリフォード代数には属さない。そのことを考慮し本稿では八元数で表された Hopfield 型 NN のモデルを 4 種類提案した。またそれらのモデルに対しそれぞれエネルギー関数の存在条件を導くとともに、実際にエネルギー関数を構成した。

参考文献

- 1) A. Hirose (ed.): Complex-Valued Neural Networks Theoris and Applications, World Scientific, 2003
- 2) T. Nitta (ed.): Complex-Valued Neural Networks Utilizing High-Dimensional Parameters, IGI Global, 2009
- 3) S. Buchholz: A Theory of Neural Computation with Clifford Algebra, Ph.D. Thesis, University. of Kiel, 2005
- 4) P. Lounesto: Clifford Algebras and Spinors 2nd Edition, Cambridge Univ. Press, 2001
- 5) L. Dorst, D. Fontijne and S. Mann: Geometric Algebra for Computer Science An object-oriented Approach to Geometry, Morgan Kaufmann Publisher, 2007.
- 6) Christian Perwass: Geometric Algebra with Applications in Engineering, Springer-Verlag 2009
- 7) J. J. Hopfield: Neurons with graded response have collective computational properties like those of two-state neurons; *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, Vol.81, pp.3088–3092, 1984.
- 8) J. J. Hopfield and D. W. Tank: Neural' computation of decisions in optimization problems; *Biol. Cybern.*, Vol.52, pp.141–152, 1985.
- 9) D. W. Tank and J. J. Hopfield, "Simple 'neural' optimization networks: an A/D converter, signal decision circuit, and a linear programming circuit," *IEEE Trans. Circuits Syst.*, **33**, 533–541, 1986.
- 10) N. Hashimoto, Y. Kuroe and T. Mori: On Energy Function for Complex-Valued Neural Networks; *Trans. of the Institute of System, Control and Information Engineers*, Vol.15, No.10, pp.559-565, 2002 (in Japanese).
- 11) Y. Kuroe, M. Yoshida and T. Mori: On Activation Functions for Complex-Valued Neural Networks - Existence of Energy Functions -; *Artificial Neural Networks and Neural Information Processing - ICANN/ICONIP 2003, Okyay Kaynak et. al.(Eds.), Lecture Notes in Computer Science*, 2714, pp.985-992, Springer, 2003.
- 12) M. Yoshida, Y. Kuroe and T. Mori: Models of Hopfield-Type Quaternion Neural Networks and Their Energy Functions; *International Journal of Neural Systems*, Vol.15, Nos.1 & 2, pp.129-135, 2005.
- 13) Y. Kuroe, S. Tanigawa and H. Iima: Models of Hopfield-type Clifford Neural Networks and Their Energy Functions - Hyperbolic and Dual Valued Networks -; *Proceedings of International Conference on Neural Information Processing, Lecture Notes in Computer Science*, 7062, pp. 560-569, Springer-Verlag, 2011.
- 14) Y. Kuroe: Models of Clifford Recurrent Neural Networks and Their Dynamics, *Proceedings of 2011 International Joint Conference on Neural Networks*, 1035/1041 (2011)
- 15) John C. Baez: The Octonions, *American Mathematical Society*, Vol.39, No.2, pp.145-205, 2001.
- 16) John H. Conway and Derek A. Smith: On Quaternions and Octonions: Their Geometry, Arithmetic, and Symmetry, A K Peters Wellesley, Massachusetts, 2003.
- 17) T. Dray and C. Manogue: The Geometry of the Octonions, World Scientific, 2015.

機械学習技術を用いた浴室内事故検知通報システム

○小林祐介 岡本卓 (千葉大学)

An incident detection and notifier system using machine learning techniques

*Y. Kobayashi and T. Okamoto (Chiba University)

Abstract An incident detection and notifier system that can monitor the condition of a human in a bathroom with keeping his/her privacy has been developed. The system judges the safety of the human in the bathroom automatically using a discriminator. When an incident is detected, the system warns his/her family or the facilities manager. This study intends to generate discriminators with high accuracy using machine learning techniques. The multi-layer neural networks, the random forest, and the support vector machine are applied. Their discrimination accuracy are compared.

Key Words: Discriminator, Machine learning, Neural Networks, Random Forest, Support Vector Machine

1 はじめに

日本において、浴室内年間死亡者数は、交通事故死亡者数を大きく上回っている。日本では、溺死の割合が非常に高く、浴槽につかる習慣が原因であるといわれている。また、入浴中において、転倒や失神による事故が起きた場合、浴室は密室であるため発見が遅れる可能性がある。そのため、浴室内を常時監視することで、事故を早期に発見し対処する必要がある。一方で、入浴中という状況下であるため、浴室内の人のプライバシーを確保しなければならない。

浴室内を監視するシステムとして、浴室内事故検知通報システム¹⁾が開発されている。このシステムでは、赤外線輝点群を浴室内に投射し、撮像素子で輝点を撮影することで、浴室内の状態を輝点群として計測する。計測された輝点群情報を識別器に入力し、危険性を自動的に判定して、必要であれば通報する。本システムでは、撮影するのは輝点のみであるため、浴室内の人のプライバシーを確保しながら監視することができる。

本研究では、機械学習技術を用いて、識別正解率の高い浴室内事故検知通報システムの識別器を生成することを目的とする。機械学習器としては、階層型ニューラルネットワーク (Neural Networks: N. N.)²⁾, Random Forest³⁾, サポートベクターマシン (Support Vector Machine: SVM)⁴⁾ を用い、未知データの識別正解率を比較する。

2 浴室内事故検知通報システムと識別器

本研究で考える浴室内事故検知通報システムでは、まず、赤外線半導体レーザーとレーザービーム分岐素子からなる輝点アレイ投影機を用いて、正方格子状の赤外線輝点群を浴室内の全域に投影し、これを輝点撮像素子で撮影する。この撮影された画像から輝点の三次元分布を算出することで、浴室内の状態を輝点群として計測する。つぎに、輝点の3次元分布を L 次元空間上のボクセルデータに変換し、これを識別器の入力とする。

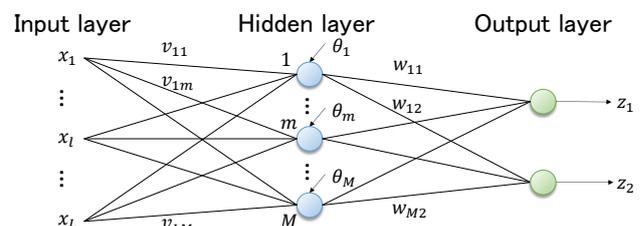


Fig. 1: Multi-layer N. N.

識別器からは、「安全」ないしは「危険」のいずれかが出力される。

本研究では、 L 次元空間のボクセルデータ $\mathbf{x} \in \{0, 1\}^L$ を入力したときに、ラベル $y \in \{0, 1\}$ (0:安全, 1:危険) を出力する識別器を構築する。なお、本研究で考えるシステムでは $L = 3080$ である。識別器を構築するための学習用データセットを $(\mathbf{x}^p, d^p), p = 1, \dots, P$ とする。ここで、 d^p はボクセルデータ \mathbf{x}^p に対する所望出力である。識別器の評価を行うための評価用データセットを $(\mathbf{x}^q, d^q), q = 1, \dots, Q$ とする。

3 階層型 N. N.

3.1 学習問題

本研究では、Fig. 1 に示すような3層の階層型 N. N. を用いる。入力層ニューロン数は $L = 3080$, 中間層ニューロン数は $M = 40$, 出力層ニューロン数は $N = 2$ とする。 $y = 0$ に対する出力を $\mathbf{z} = (0, 1)^T$ とし、 $y = 1$ に対する出力を $\mathbf{z} = (1, 0)^T$ として学習を行い、未知データを識別する際には、出力層の z_1, z_2 について、 $z_1 > z_2$ であれば 0 を、 $z_1 < z_2$ であれば 1 を識別結果とする。

Fig. 1 に示す階層型 N. N. の入力層と中間層間の重みをまとめて $V \in \mathbb{R}^{L \times M}$, 中間層の閾値をまとめて $\theta \in \mathbb{R}^M$, 中間層と出力層間の重みをまとめて $W \in \mathbb{R}^{M \times N}$ とする。学習用データセットの入力をまとめて $X = [\mathbf{x}^1, \dots, \mathbf{x}^P]$ とすると、N. N. の学習問題は、自

乗誤差関数最小化問題として、

$$\underset{V, W, \theta}{\text{minimize}} E(V, W, \theta; X) \quad (1a)$$

$$E(V, W, \theta; X) = \frac{1}{2} \sum_{p=1}^P \sum_{n=1}^N (d_n^p - z_n(V, W, \theta; \mathbf{x}^p))^2 \quad (1b)$$

で与えられる。本研究では、中間層と出力層の活性化関数にシグモイド関数を用いる。

3.2 降下符号ベクトル法

本研究では、学習問題(1)を解くために最急降下法と降下符号ベクトル法⁵⁾を適用し、その結果を比較する。

最急降下法を用いた N. N. の学習では、誤差関数に平坦な部分がある場合に、学習が停滞してしまうことがある。また、局所的最適解に収束したとしても、場合によっては、すべて安全ないしは危険と判定する識別器が生成されることがある。

降下符号ベクトル法では、誤差関数の勾配の符号のみを抽出し、その移動量は強制的に与える探索モデルを用いて解を探索する。この探索モデルでは、探索序盤は大域的探索を行い、探索終盤は局所的探索を行うように移動量を調整する。移動量が勾配の大きさに依存しないため、学習が停滞状態に陥りにくいと期待される。学習問題(1)に対する降下符号ベクトル法による探索モデルは、

$$v_{lm}(k+1) = v_{lm}(k) - r_v(k) \operatorname{sgn} \left(\frac{\partial E(V, W, \theta; X)}{\partial v_{lm}} \right), \quad l = 1, \dots, L, m = 1, \dots, M \quad (2a)$$

$$\theta_m(k+1) = \theta_m(k) - r_\theta(k) \operatorname{sgn} \left(\frac{\partial E(V, W, \theta; X)}{\partial \theta_m} \right), \quad m = 1, \dots, M \quad (2b)$$

$$w_{mn}(k+1) = w_{mn}(k) - r_w(k) \operatorname{sgn} \left(\frac{\partial E(V, W, \theta; X)}{\partial w_{mn}} \right), \quad m = 1, \dots, M, n = 1, \dots, N \quad (2c)$$

$$r_\xi(k) = \rho (\xi^u - \xi^l) \left(1 - \frac{k}{k_{\max}} \right), \quad \xi = v, \theta, w \quad (2d)$$

で与えられる。ここで、 $\operatorname{sgn}(y)$ は y の符号を返す符号関数である。 k_{\max} は最大探索ステップ数である。本研究では、 $v^u = \theta^u = w^u = 5$, $v^l = \theta^l = w^l = -5$ とし、 $\rho = 0.01$, $k_{\max} = 200$ とする。

4 Random Forest

Random Forest は集団学習アルゴリズムの一つである。Random Forest による分類器では、トレーニングセットからブートストラップサンプリングすることで得られた複数のデータセットそれぞれに対して決定木を生成し、各決定木の多数決によって分類を行う。決

定木の学習においてノードの分岐関数を求める際には、すべての特徴量を用いるわけではなく、特徴量の中からいくつかランダムに選択し、選択された特徴量のみを考慮する。決定木の学習手法としては、CART を用いる。CART では、2進木を構築する。ノードの分岐関数としては、分岐後の情報利得 ΔI が最大となる関数を求める。情報利得 ΔI は、

$$\Delta I = I(A) - \frac{N_{\text{left}}}{N_A} I(A_{\text{left}}) - \frac{N_{\text{right}}}{N_A} I(A_{\text{right}}) \quad (3)$$

で与えられる。ここで、 A は親ノード、 A_{left} と A_{right} は子ノード、 N_A , N_{left} , N_{right} はそれぞれ親ノードと各子ノードに含まれるデータ数を示す。関数 I はノードの Gini 係数を返す関数である。分岐後に生成された子ノードについても同様に、分岐関数を求め、最大木を生成する。

本研究では、Python の scikit-learn モジュール⁶⁾の RandomForestClassifier を用いて識別器を構成する。決定木の数を 100, 分岐関数を求める際に用いる特徴量の数を \sqrt{L} とする。

5 SVM

SVM は、優れた汎化能力をもつパターン識別器として知られており、ベクトル空間を 2 つに分離する超平面を用いて、未学習データを 2 つの集合に分類するパターン識別器である。

学習用データセット (\mathbf{x}^p, d^p) , $p = 1, \dots, P$ を超平面 $f(\mathbf{x}) = 0$ を用いて 2 つの集合 $X^+ = \{\mathbf{x}^p \mid d^p = 1\}$, $X^- = \{\mathbf{x}^p \mid d^p = -1\}$ に分離することを考える。 $d^p f(\mathbf{x}^p) - 1 \geq 0$, $p = 1, \dots, P$ であれば、 $f(\mathbf{x}) = 0$ によって 2 つの集合 X^+ , X^- を識別していることになる。SVM では、超平面からもっとも近い $\mathbf{x}^+ \in X^+$ と $\mathbf{x}^- \in X^-$ までの距離 (最小幾何マージン) を考え、最小幾何マージンを最大化する超平面を学習することで、未知サンプル点に対する汎化能力の高い識別器を構築する。現実の問題では、学習用データセットを完璧に分離する $f(\mathbf{x})$ が存在するとは限らないので、ペナルティを与えて誤分類を許容する。さらに、学習用データセットによっては、超平面による分離が困難な場合があるので、学習サンプル点 $\mathbf{x}^p, p = 1, \dots, P$ を超平面による分離が有効な高次元空間に写像した上で、分離超平面を学習する。写像空間上で学習した超平面は、元の空間上では超曲面となり、未学習データの非線形識別が可能となる。

上述の非線形ソフトマージンサポートベクターマシンの学習問題は、

$$\underset{\lambda}{\text{maximize}} f(\lambda) \quad (4a)$$

$$\text{subject to } \sum_{p=1}^P \lambda^p d^p = 0 \quad (4b)$$

$$0 \leq \lambda^p \leq C, p \in P \quad (4c)$$

$$\text{where } f(\boldsymbol{\lambda}) = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\lambda}^T H \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{c}^T \boldsymbol{\lambda} \quad (4d)$$

$$h_{pq} = d^p d^q K(\mathbf{x}^q, \mathbf{x}^p), \\ p = 1, \dots, P, q = 1, \dots, P \quad (4e)$$

$$\mathbf{c}^T = (1, \dots, 1) \quad (4f)$$

で与えられる。ここで $K(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ は高次元空間への写像を規定するカーネル関数である。この問題の最適解 $\boldsymbol{\lambda}^*$ を用いると、識別関数は、

$$f(\mathbf{x}) = \sum_{p=1}^P \lambda^{p*} d^p K(\mathbf{x}, \mathbf{x}^p) + b^* \quad (5a)$$

$$b^* = \frac{1}{|S'|} \sum_{s \in S'} \left(z^s - \sum_{p=1}^P \lambda^{p*} d^p K(\mathbf{x}^s, \mathbf{x}^p) \right) \quad (5b)$$

で与えられる。ここで、 S' は $\lambda^{p*} = C$ に対応するサポートベクトルを除いたサポートベクトルの成分番号集合である。

本研究では、Python の scikit-learn モジュールの SVC を用いて識別器を構成する。カーネル関数として RBF カーネル

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \exp(-\gamma \|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|^2) \quad (6)$$

を用い、 $\gamma = 0.01$ 、 $C = 100$ とする。

6 数値実験

本研究では、Table 1 に示す 14 名の被験者によるデータセットを用いる。1 名分のデータセットには、安全状態、危険状態に対する輝点データが複数含まれている。たとえば、安全状態には、椅子に座っている状態に対応する輝点データなどが含まれており、危険状態には、床に倒れている状態に対応する輝点データなどが含まれている。13 名分のデータセットを学習用データセット、残り 1 名分のデータセットを評価用データとする。たとえば、被験者 #1 のデータセットを評価用データセットとする場合、学習用データセットの数は $P = 12, 293$ となり、評価用データセットの数は $Q = 947$ となる。

まず、階層型 N. N. の学習問題 (1) に最急降下法と降下符号ベクトル法を適用した場合の評価用データセットに対する識別正解率を比較する。それぞれの手法について、初期解を変更しながら 5 試行し、評価用データセットに対する識別正解率の最良値と最悪値を得る。被験者 #1 を評価用データセットとした場合の実験結果を Tabel 2 に示す。

Tabel 2 を見ると、最良値と最悪値いずれにおいても、降下符号ベクトル法の方が高い識別正解率を得られていることがわかる。また、最急降下法では最悪値を取るとき、ほとんどの評価用データを危険と判定する識別器が生成されており、安全と危険合わせて 50% 程度の正解率しか得られていない。一方で、降下符号ベクトル法では、最悪値を取る場合でも、90% 以上の正解率を維持している。このように、階層型 N. N. の学習問題 (1) に対して、降下符号ベクトル法は最急降下

Table 1: Data sets

Subject	Safe	Danger	Total
#1	501	446	947
#2	501	425	926
#3	502	488	990
#4	465	485	950
#5	462	468	930
#6	575	662	1237
#7	470	470	940
#8	459	417	876
#9	453	455	908
#10	434	349	783
#11	441	344	785
#12	521	507	1028
#13	486	425	911
#14	503	526	1029

Table 2: Accuracy rate by the multi-layer N. N. using the steepest descent method and the descent sign vector method for the evaluation data set by the subject #1

	Accuracy rate			
	Safe	Danger	Total	
Steepest descent method	Best	0.826	0.960	0.871
	Worst	0.020	1.000	0.482
Descent sign vector method	Best	0.872	0.987	0.926
	Worst	0.862	0.964	0.910

法より有効であることがわかる。以降では、階層型 N. N. の学習問題を解くために、降下符号ベクトル法を用いる。

つぎに、階層型 N. N., Random Forest, SVM を用いて識別器を生成し、評価用データでの識別正解率を比較する。階層型 N. N. は初期状態を変更しながら、Random Forest は乱数のシードを変更しながら 5 試行し、評価用データセットに対する識別正解率の最良値を求める。SVM については 1 試行のみ行う。それぞれの手法について、評価用データセットを与える被験者を変更しながらすべての被験者について実験を行った結果を Tables 3-5 に示す。

Tables 3-5 の正解率の平均を見ると、いずれの手法においても、安全と危険を合わせて 94.6% 以上の正解率となっていることがわかる。その中でも Random Forest の正解率もっとも高く、安全と危険を合わせて 96% 程度の正解率が得られている。被験者ごとに結果を比較すると、被験者 #12 を評価対象とした場合については、いずれの手法についても 95% 以上の高い正解率が得られている一方で、被験者 #7 を評価対象とした場合では、危険な状態に対する正解率がいずれの手法においても 92% を下回っていることがわかり、評価対象によって

Table 3: Accuracy rate by the multi-layer N. N. for the evaluation data sets

Evaluated subject	Accuracy rate		
	Safe	Danger	Total
#1	0.872	0.987	0.926
#2	0.930	0.946	0.937
#3	0.966	0.984	0.975
#4	0.996	0.920	0.957
#5	1.000	0.947	0.973
#6	0.972	0.992	0.983
#7	0.936	0.834	0.885
#8	0.961	0.942	0.952
#9	0.956	0.938	0.947
#10	0.906	0.957	0.928
#11	0.948	0.933	0.941
#12	0.998	1.000	0.999
#13	0.938	0.984	0.959
#14	0.970	0.964	0.967
Average	0.953	0.952	0.952

Table 4: Accuracy rate by the random Forest for the evaluation data sets

Evaluated subject	Accuracy rate		
	Safe	Danger	Total
#1	0.910	0.998	0.951
#2	0.984	1.000	0.991
#3	0.986	0.988	0.987
#4	0.996	0.905	0.949
#5	0.996	0.964	0.980
#6	0.986	0.988	0.987
#7	0.957	0.881	0.919
#8	0.983	0.928	0.957
#9	0.985	0.879	0.931
#10	0.942	0.986	0.962
#11	0.961	0.936	0.950
#12	1.000	1.000	1.000
#13	0.924	1.000	0.959
#14	0.970	0.958	0.964
Average	0.970	0.958	0.963

は、識別率が低下してしまうことがわかる。これは、浴室利用者の体格の差が1つの原因であると考えられる。

7 おわりに

本研究では、浴室内事故検知通報システムのための識別器を階層型 N. N., Random Forest, SVM を用いて生成し、各手法について評価用データセットに対する識別正解率を比較した。Random Forest を用いた場合がもっとも良い結果となり、96%程度の識別正解率が得られた。

今後の課題としては、浴室利用者の体格によって正

Table 5: Accuracy rate by the SVM for the evaluation data sets

Evaluated subject	Accuracy rate		
	Safe	Danger	Total
#1	0.918	0.991	0.952
#2	0.928	0.955	0.940
#3	0.950	0.996	0.972
#4	0.996	0.934	0.964
#5	0.976	0.863	0.919
#6	0.977	0.961	0.968
#7	0.947	0.806	0.877
#8	0.963	0.959	0.961
#9	0.943	0.897	0.920
#10	0.917	0.926	0.921
#11	0.950	0.923	0.934
#12	0.969	1.000	0.984
#13	0.961	0.995	0.977
#14	0.970	0.943	0.956
Average	0.955	0.939	0.946

解率が低下しない識別器を生成することがあげられる。また、多数の N. N. による識別器の構成も今後の課題である

謝辞

本研究で用いたデータセットは、株式会社アイデアクエストから提供されたものである。また、本研究は、株式会社アイデアクエストに対する AMED 平成 27 年度 ロボット介護機器開発導入促進事業（開発補助事業）の助成により、千葉大学が受託研究を行ったものである。

参考文献

- 1) 株式会社アイデアクエスト: 浴室見守り装置-研究開発アイデアクエスト, <http://www.ideaquest4u.com/rd/rd05/>, Accessed on June 20th, 2016
- 2) 相吉, 岡本, 安田: 最適化手法の基礎—力学モデルによる理解と実装—, 森北出版 (2014)
- 3) L. Breiman: Random Forests, Machine Learning, **45**, 5/32 (2001)
- 4) 竹内, 烏山: サポートベクトルマシン, 講談社 (2015)
- 5) 岡本, 平田: 初期離散化幅の調整を伴わないカオス最適化手法, 計測自動制御学会論文集, **48-3**, 125/133 (2012)
- 6) F. Pedregosa, et al.: Scikit-learn: Machine learning in Python, Journal of Machine Learning Research, **12**, 2825/2830 (2011)

自己符号化器による静脈画像の雑音除去

○柏原考爾 (徳島大学)

Denoising of Vein Images Based on the Autoencoder

* K. Kashihara (Tokushima University)

Abstract— Sitting on a narrow seat during a long flight may induce dyspnea and acute myocardial infarction triggered by deep venous thrombosis. Compared with complicated diagnostic systems, low-cost infrared cameras can noninvasively and simply capture vein images. However, the recorded image results in low contrast and a low signal-to-noise (S/N) ratio. For this study, the autoencoder and the genetic algorithm (GA) with the expectation maximization (EM) algorithm were assessed for the visualization of veins. Vein images were obtained from a near-infrared camera. The autoencoder showed the ability to remove the external noise added to the target images. The GA-EM algorithm was also able to automatically create the filter to modify the worse S/N ratio of vein images. If the proposed methods are incorporated into e-healthcare applications, they could facilitate to find abnormal veins at an early stage.

Key Words: Image filter, Genetic algorithm, EM algorithm, Infrared camera, Filter kernel

1 はじめに

長時間のフライトや地震等の震災により車中泊を余儀なくされた環境では、末梢静脈で生成された血栓が心臓や肺の血管まで飛来し、急性肺動脈血栓塞栓症(エコノミークラス症候群)^{1), 2)}を引き起こすことがある。また、下肢の表在静脈に血液が溜まることで血管が蛇行し、瘤のように膨れ上がる病気(下肢静脈瘤³⁾)もある。生活習慣病や日常生活でのストレスにより、静脈に僅かな変化や異常が生じている可能性もある。

通常、静脈異常の診断では、超音波やX線造影等を行うため、大掛かりで操作が複雑な医療装置と熟達した医師や技師が必須となる。一方で、静脈の状態を非侵襲で簡易的に測定できれば、より早期段階での異常検出に繋げられる。また、スマートフォンやタブレット端末等により、誰もが容易に静脈の異常を検知できるヘルスケアモニタリングシステムにも役立てられる。

近赤外波長(700~1,000 nm 付近)は、生体組織を透過し易い。特に、静脈内のヘモグロビンは、この波長領域の吸光係数が高いため、近赤外線カメラの映像として、非侵襲かつ簡易的に静脈を可視化^{4), 5), 6)}できる。しかし、撮影環境やカメラの性能によるS/N比の低下(低コントラストやスペckルノイズ等)が問題⁷⁾となる。また、カメラに付属する撮影パラメータ(フォーカス・ゲイン・露出・コントラスト等)の自動調節機能や手動設定も画質低下に繋がる場合もある。さらに、近赤外光を照射しながら、赤外線カメラで撮影をする場合、高画質の映像を得られるとは限らない。従って、赤外線カメラの映像では、如何に外部雑音を効果的に除去するかが課題となる。

この問題を解決し、静脈の僅かな変化を高精度に検出するには、効果的なフィルタ処理による外部雑音の除去や低コントラスト画像の鮮鋭化を行う必要がある。静脈画像には、各種フィルタ(イコライゼーション・2値化・Cannyフィルタ・ガボールフィルタ・確率共鳴・GA-EMアルゴリズム⁸⁾等)を適用できる。例えば、遺

伝的アルゴリズム(GA)とEMアルゴリズム(期待値最大化法)の複合化(GA-EMアルゴリズム⁹⁾)により、最適な画像フィルタを自動設計できる。この手法では、EMアルゴリズムに基づき、輝度ヒストグラムの各分布をガウシアン混合モデルにフィッティングさせることで、静脈部を背景から分離する。正解画像が未知の状況でも、フィルタカーネルの最適な組み合わせを探索できるメリットもある。

上述の様なフィルタ処理に加えて、近年、自己符号化器(Autoencoder⁸⁾)による雑音除去の有効性が報告されている。自己符号化器では、入力画像そのものが出力されるように学習(教師なし学習)を進め、雑音除去を目的とした使用もなされている。特に、静脈画像の解析では、細く複雑な血管情報を消失させず、雑音除去や鮮鋭化等のフィルタ処理を行うことが求められる。従って、学習データ数を十分に揃えながら、学習条件を適切に設定することで、より汎化能力の高い自己符号化器を検討する必要がある。

本研究では、赤外線カメラにより得られた静脈画像から、効果的に雑音の除去を行うための解析手法を検討した。特に、自己符号化器とGA-EMアルゴリズムを用いて、細く複雑な形状を持つ静脈画像に対するフィルタリング処理の効果を検討した。

2 解析方法

ガウシアン分布に従う雑音を付加した静脈画像(2.1節)を用いて、各種フィルタの効果を検討した。本研究では、①自己符号化器(2.2節)に加えて、②GAにより自動生成したフィルタ(2.3節)も用いた。

2.1 データセット

可視光カットフィルタを装着したCCDカメラにより、指尖部の静脈像を記録したデータ⁶⁾を解析に使用した。指尖部に対して、撮影カメラと反対側から近赤外光(波長780 nm)を照射している。解析対象となる画像(8 bitのグレースケール)のサイズは、28×28ピクセルとした。これらの元画像の各画素値に対し、ガ

ウシアンノイズ ($\mu=0, \sigma=15$) を付加した。

2.2 自己符号化器

(1) 自己符号化器の概要

自己符号化器では、入力データの次元圧縮により特徴表現を行い、元の入力データを復元する様なパラメータを学習 (教師なし学習) する。活性化関数が線形の場合、入力データの次元圧縮により意味のある情報を得るには、入力層よりも中間層のユニット数が小さくしなければならない。Fig. 1に基本的な自己符号化器 (3層) のネットワークを示す。このネットワークは、入力層・中間層・出力層 (=復元層) から構成される。

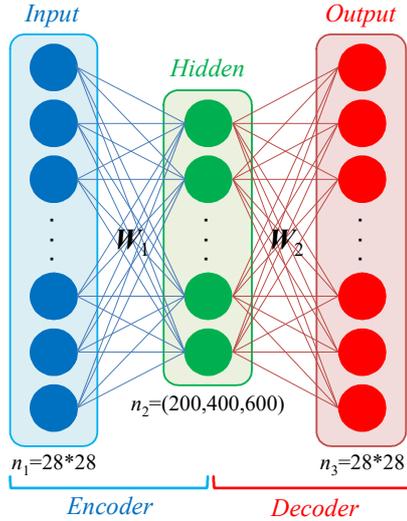


Fig. 1: Structure of an autoencoder with three layers: input, hidden, and output layers.

入力データを \mathbf{x} , ネットワークの重みを \mathbf{W}_1 とすると、中間層の出力は、 $\mathbf{y} = f_1(\mathbf{W}_1\mathbf{x} + \mathbf{b}_1)$ となる。 $f(\cdot)$ は活性化関数、 \mathbf{b} はバイアスを示す。この入力層から中間層までの変換を符号化 (encode) と呼ぶ。同様に、中間層から出力層までは、 $\hat{\mathbf{x}} = f_2(\mathbf{W}_2\mathbf{y} + \mathbf{b}_2)$ で表され、この変換を復号化 (decode) と呼ぶ。最終的に、入力データ \mathbf{x} (入力画像の各画素値) から最終出力 $\hat{\mathbf{x}}$ (出力画像の各画素値) までは、下記の式(1)で表される。

$$\hat{\mathbf{x}} = f_2(\mathbf{W}_2 f_1(\mathbf{W}_1\mathbf{x} + \mathbf{b}_1) + \mathbf{b}_2) \quad (1)$$

自己符号化器では、入力データ \mathbf{x} と最終出力 $\hat{\mathbf{x}}$ が同じ値になる様に学習を行う。誤差関数 E には、下記の式(2)で表される二乗誤差関数を用いる。

$$E = \sum_{n=1}^N \|x_n - \hat{x}_n\|^2 \quad (2)$$

ここで、 \mathbf{x}_n は入力データ、 $\hat{\mathbf{x}}_n$ は出力データを示す。この誤差関数を最小にするため、誤差逆伝播法により、最適な重みパラメータを学習する。

また、雑音除去自己符号化器⁹⁾では、入力 \mathbf{x} にガウス分布に従うノイズ (平均0, 分散 σ^2) を付加した場合、ノイズ加算前の元の入力 \mathbf{x} に近づく様に学習をする。

(2) パラメータ設定

確率的勾配降下法で学習させる際のミニバッチのサイズは 100, エポック数は 200 に設定した。また、自

己符号化器の中間層のユニット数は、200, 400, 600 の3段階とした。活性化関数は ReLU とし、ドロップアウトを適用した。学習率の調整は Adam とし、損失関数は平均二乗誤差 (式(2)の各エポックでの平均値) とした。

自己符号化器の訓練データとテストデータを作成するため、データセットから 43 枚の元画像を準備した。その元画像に対して、画像回転 (90° 毎), 左右反転, 明るさの変更等を施し、合計 1000 枚の画像を作成した。最終的に、訓練データには 980 枚, テストデータ (未知画像) には 20 枚を割り当てた。

2.3 GA によるフィルタの自動生成

EM アルゴリズムと実数値 GA の組み合わせ (GA-EM アルゴリズム) により、静脈部を背景と分離できる画像フィルタの自動生成法を以下に示す。

(1) GA-EM アルゴリズムの概要

(a) GA の手順: GA は選択・交叉・突然変異の各操作から成る。最初に、個体の集合体である母集団の初期値をランダムに生成する。個体はフィルタカーネルに対応する実数値の配列とし、適応度を計算 (下記(b)参照) する。最大の適応度を示す組み合わせを探索することで、最適な画像フィルタを生成できる。選択では、次の交叉に用いる個体を母集団から選ぶ。トーナメント選択を用いた場合、個体群の中から設定したトーナメントサイズ分だけ個体をランダムに選び、その中で最も適応度の高い個体を残す。交叉では、親個体から子個体を生成する。突然変異は、幾つかの個体をランダムに変化させることで局所解に陥ることを防ぎ、母集団の多様性を促進する。上述の操作を繰返し、母集団を更新しながら、適応度を改善する。

(b) EM アルゴリズムによる適応度算出: GA の適応度は、対象画像へ適用するフィルタカーネルに依存する。GA の処理により更新されるフィルタカーネルは、画像雑音を低減させながら、解析対象となる部分を強調できるような設計が望ましい。正解画像を事前に準備できれば、その画像と類似度の高いフィルタカーネルを生成できる。しかし、実際の静脈画像の解析では、正解画像は未知となる。従って、生成したフィルタ適用後の画像の輝度ヒストグラムに対し、EM アルゴリズムを用いることで、GA の適応度を評価した。

適応度は混合正規分布モデルの対数尤度 (式(3)) から求める。

$$p(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^K \pi_k G(\mathbf{x} | \theta_k) \quad (3)$$

G はパラメータ $\theta_k = \{\text{平均ベクトル } \boldsymbol{\mu}_k, \text{ 共分散行列 } \boldsymbol{\Sigma}_k\}$ の正規分布を示す。 \mathbf{x} は d 次元のデータベクトル、 π_k は分布の混合比 ($\pi_k \geq 0$ かつ $\sum \pi_k = 1$)、 K は確率モデル数を示す。本研究では、静脈と背景に対応する 2 つの確率モデルを想定するため、 $K = 2$ とした。この 2 つの確率分布を分離するフィルタカーネルを設計すれ

ば, GA の適応度が高くなり, 静脈部と背景を適切に分離できる (Fig. 2) .

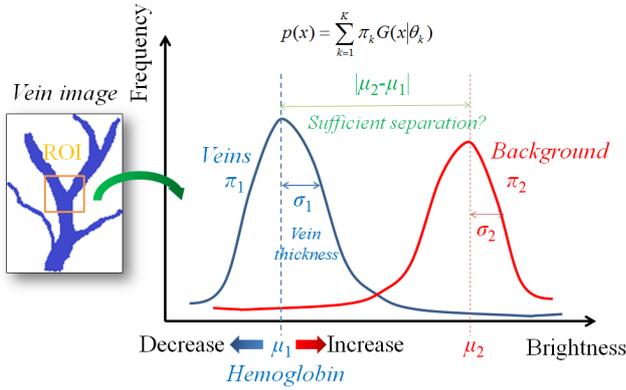


Fig. 2: Separation of veins and a background based on a brightness histogram.

EM アルゴリズム⁶⁾は, *E-Step* (期待値) と *M-Step* (最大化) の組み合わせから構成される. 観測データ \mathbf{x} ($d=1$ で N 個のデータサンプル: 対象画像のピクセル数分) は, 生成されたフィルタ適用後の輝度値を示す. 各パラメータ値 (π_0, μ_0, Σ_0) の初期化後, 以下の手順を繰り返す.

E - Step : 混合正規分布モデルにおいて, 隠れ変数 z_{ik} の事後確率を式(4)から計算する.

$$\gamma(z_{ik}) = \frac{\pi_k G(x|\mu_k, \Sigma_k)}{\sum_{j=1}^K \pi_j G(x|\mu_j, \Sigma_j)} \quad (4)$$

M - Step : 完全データの対数尤度を最大化するため, 新規パラメータ $\theta^{(new)}$ を求める. 混合正規分布モデルにおいて, $\theta^{(new)}$ は式(5)の各パラメータ $\pi_k^{(new)}, \mu_k^{(new)}, \Sigma_k^{(new)}$ の計算から求められる.

$$\left\{ \begin{array}{l} \pi_k^{(new)} = \frac{N_k}{N} \\ \mu_k^{(new)} = \frac{\sum_{i=1}^N \gamma(z_{ik}) x_i}{N_k} \\ \Sigma_k^{(new)} = \frac{\sum_{i=1}^N \gamma(z_{ik}) (x_i - \mu_k)(x_i - \mu_k)^T}{N_k} \\ \text{但し, } N_k = \sum_{i=1}^N \gamma(z_{ik}) \end{array} \right. \quad (5)$$

(2) パラメータ設定

GA の母集団のサイズは 40, トーナメント選択のサイズは 20, 交叉確率は 0.6, 突然変異の確率は 0.1 とした. 母集団の個体の初期値は, 設定範囲内 ($[-3, 3]$) でランダムに生成した. 実数値 GA の交叉法には, BLX- α 法 (ブレンド交叉: $\alpha = 0.4$) を用いた. また, GA により求めるフィルタカーネルのサイズは, 3×3 ピクセル

とした. EM アルゴリズムの反復回数は, 計算コストを考慮して 10 回に設定した. また, 混合正規分布モデルの初期パラメータは, $\pi_0 = (0.5, 0.5), \mu_0 = (-0.5, 0.5), \Sigma_0 = (0.1, 0.1)$ とした. 特異性 (推定する分布の分散が 0) を避けるため, 画素値が白または黒の領域を持つ場合, 評価関数にペナルティを加えた. GA の処理は, 第 100 世代に到達するまで繰り返した.

3 解析結果

第 2 章で説明した解析手法を用い, 複雑な形状を含む静脈画像に対して, 雑音除去した結果を以下に示す.

3.1 自己符号化器

自己符号化器 (中間層 = 200, 400, 600) の学習曲線を Fig. 3 ((a) 訓練データ, (b) テストデータ) に示す. 全体的にエポック数が進むにつれて, 学習誤差が減少した. 訓練データでは学習誤差が早期に収束するが, 未知のテストデータでは収束までに誤差の増減がみられた. また, 中間層のユニット数が多い場合, より早期段階で学習誤差が低減した. 従って, エポック数が少ない場合, 中間層による圧縮率が高くなりすぎ, 元画像の十分な復元ができない可能性がある.

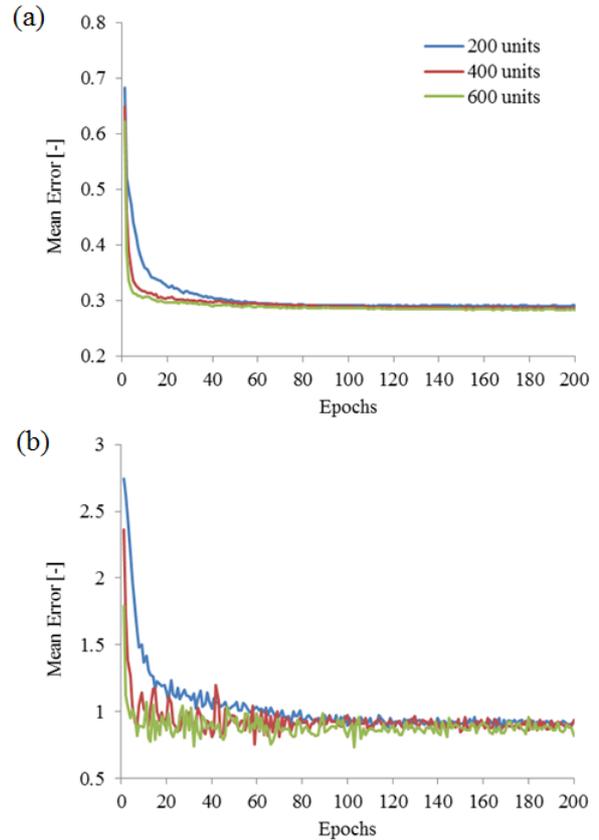


Fig. 3: Change of mean errors during (a) training and (b) testing periods (the unit numbers of the hidden layer: 200, 400, and 600).

最終エポックまで結合重みを学習した後の自己符号化器をテストデータに適用した (Fig. 4(c)-(e)). 特に, 中間層のユニット数 (200, 400) が少ない場合, 静脈の

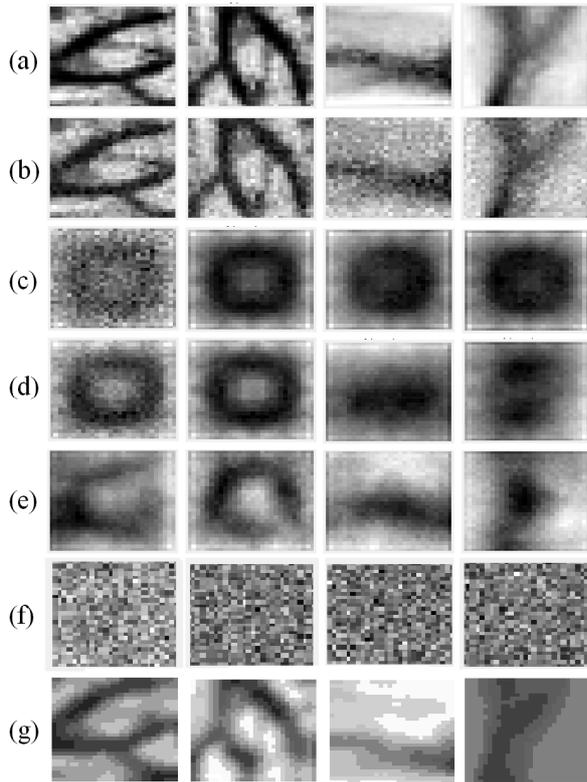


Fig. 4: Examples of test data ((a) no noise and (b) added noise); outputs of the autoencoder with the hidden layer of (c) 200, (d) 400, and (e) 600 units; (f) visualization of weights between the input and hidden layers; (g) the results of the GA-EM algorithm.

複雑な形状を汎化的に復元できなかつた。一方、中間層のユニット数(600)が多くなると、未知画像に対する雑音除去は適切に行われた。しかし、次元圧縮の影響のため、静脈の特徴が平滑化された出力画像となった。また、Fig. 4(f)に可視化した入力と中間層の間の重み(中間層:600, エポック数:200)の一例を示す。特に、ガウシアンノイズの様な特徴が視認された。

3.2 GAにより自動生成したフィルタ

GAの世代数による適応度の変化をFig. 5に示す。第25世代辺りから、適応度の最大値が収束し始めた。各世代の適応度の平均値は、第100世代に到達するまで、徐々に上昇を続けた。適応度が最大となるフィルタカーネルを適用して、静脈画像の雑音除去を行った。特に、EMアルゴリズムを用いることで、雑音除去とともに、背景と比べて静脈をより強調できるフィルタ特性(Fig. 4(g))となった。

4 考察

雑音除去を目的として学習した自己符号化器により、静脈画像に付加されたガウシアンノイズを低減させる効果がみられた。特に、自己符号化器による次元圧縮の処理により、入力データの特徴抽出とともに、入力画像と無関係である雑音の確率分布を学習し、効率的に雑音除去を完遂できたことが示唆される。一方、次元圧縮の処理により、全体的にぼやけた画像が出力さ

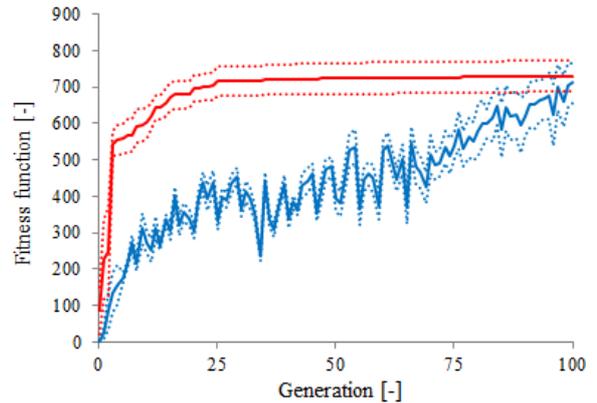


Fig. 5: Change in the fitness function values during the GA process. Blue line, the average fitness function values in each generation; red line, the maximum values; dotted line, the standard errors (four examples of Fig. 4).

れた。また、細く複雑な静脈の形状では、詳細な情報が抜け落ちる可能性があることにも注意を要する。但し、自己符号化器の各パラメータや学習条件を適切に設定できれば、より精度を向上できると考えられる。

入力と中間層の重み(Fig. 4(f))を可視化した結果、ガウシアンノイズの特徴は確認できたが、静脈の形状を示す特徴は明確に視認できなかった。しかし、充分な学習条件(エポック回数, 中間層のユニット数, 訓練データ数)を整えば、可視化した結合重みに静脈形状の特徴を示す情報が表出してくる可能性が高い。

通常、静脈画像を解析・診断する場合には、正解画像が未知であるため、学習後の自己符号化器が高い汎化能力を持つ必要がある。そのため、より鮮明な画像から構成される学習データを準備することも重要となる。撮影環境や使用するカメラ自体のノイズパターンを学習するには、正解が既知であるキャリブレーション用(静脈以外)の形状パターンの利用も有効かもしれない。さらに、自己符号化器の中間層を多層にした場合⁹⁾も、雑音除去に効果があると考えられる。

今回の自己符号化器の評価では、外部雑音の除去能力に焦点を絞った。しかし、種々の撮影環境下で、細く複雑な静脈の形状を高精度に捉える場合、確率分布に従う外部雑音以外にも、画質を低下させる要因が混在すると考えられる。また、赤外線カメラで撮影した画像だけから、皮膚の奥に隠れた静脈自体の形状や状態を正確に推定(復元)することは難しい。従って、未知の静脈領域の推定や鮮鋭化には、ディープラーニングによる超解像処理等の適用が有効かもしれない。

GA-EMアルゴリズムは、複雑な静脈の形状を抽出する上で有効となる。また、自動生成した画像フィルタは、低いS/N比にもかかわらず、静脈形状を適切に強調できた。このアルゴリズムでは、正解画像が未知であっても、対象画像の特徴(撮影環境の違いや個人差)に適応しながら、フィルタカーネルの配列を自動的に修正できる点がメリットとなる。

病態診断等の高精度の画像解析に、自己符号化器やGA-EMアルゴリズムを用いるには、更なる改善が必要となる。また、ヘルスケアモニタリングを目的とする場合、種々の外部刺激(血管圧迫・温度・ストレス

等) に対する指尖部の静脈の変化を見ることで, 日常生活における健康状態を評価できる可能性がある⁶⁾. ウェアラブルデバイス, スマートフォンやタブレット端末のアプリケーションへ自己符号化器や GA-EM アルゴリズムを適用した画像処理を組み込むこともできる.

5 まとめ

近赤外線カメラにより撮影した静脈画像の雑音除去のため, 自己符号化器を適用した. 十分な学習を行った自己符号化器では, 次元圧縮により入力データの特徴を抽出しながら, 画像に付加された雑音の除去を完遂できる可能性が示唆された. また, GA-EM アルゴリズムでは, フィルタカーネルの配列を自動的に修正しながら, 静脈形状を強調することができた. 今後, 日常生活でのストレスや疲労等に起因した静脈の僅かな状態変化を, 早期段階で非侵襲かつ容易にチェックできる画像処理システムへ拡張していく.

参考文献

- 1) P. Feltracco, S. Barbieri, F. Bertamini, E. Michieletto, and C. Ori: Economy class syndrome: still a recurrent complication of long journeys, *Eur. J. Emerg. Med.*, vol. 14, pp. 100–103 (2007)
- 2) 中嶋優, 宮澤拓未, 鈴木健太, 鈴木仁, 榛沢和彦, 福本一朗: 近赤外光による表在静脈イメージングを用いた深部静脈血栓症リスク評価に関する基礎研究, *信学技法, MBE, ME とバイオサイバネティクス*, vol. 108, no. 219, pp. 115–118 (2008)
- 3) M. J. Callam: Epidemiology of varicose veins, *Br. J. Surg.*, vol. 81, pp. 167–173 (1994)
- 4) 柏原考爾: Automatic creation of an original image filter based on the GA with EM algorithm for vein shapes, *SICE ライフエンジニアリング部門シンポジウム 2013 論文集*, pp. 419–422 (2013)
- 5) K. Kashihara: Automatic creation of an efficient image filter based on the genetic algorithm for evaluation of veins, *Proc. of 7th International Conference on Health Informatics (HEALTHINF 2014)*, pp. 506–510 (2014)
- 6) K. Kashihara and M. Iwase: Automatic design of an effective image filter based on an evolutionary algorithm for venous analysis, *Network Modeling Analysis in Health Informatics and Bioinformatics*, vol. 5, no. 1, pp. 1–14 (2016)
- 7) L. Chen, H. Zheng, L. Li, P. Xie, and S. Liu: Near-infrared dorsal hand vein image segmentation by local thresholding using grayscale morphology, *The 1st International Conference on Bioinformatics and Biomedical Engineering (ICBBE 2007)*, pp. 868–871 (2007)
- 8) G. E. Hinton and R. R. Salakhutdinov: Reducing the dimensionality of data with neural networks, *Science*, vol. 313(5786), pp. 504–507 (2006)
- 9) P. Vincent, H. Larochelle, I. Lajoie, Y. Bengio, and P. A. Manzagol: Stacked denoising autoencoders: Learning useful representations in a deep network with a local denoising criterion, *Journal of Machine Learning Research*, vol. 11, pp. 3371–3408 (2010)

謝辞 本研究の一部は, 日本学術振興会 科学研究費補助金 (基盤研究(C) 25330171) により実施した.

単一縞情報を用いた3次元計測のための ブランチカット型符号推定法

○北原 大地 山田 功 (東京工業大学)

A Branch Cut Type Sign Estimator for 3D Measurement from A Single Fringe Pattern

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

Abstract—Fringe projection is a technique to measure three-dimensional (3D) shapes of objects by projecting structured light patterns onto the objects. Many fringe projection techniques first compute, by using at least three fringe patterns, the cosine and the sin of the continuous phase distribution which corresponds to the 3D shape of the object, and then estimate the continuous phase by some phase unwrapping algorithm. In the last two decades, for 3D measurement of transient phenomena, reconstruction of the continuous phase from a single fringe pattern has been challenged. In this case, since we can use only the cosine of the continuous phase, we have to estimate sign function of the sine of the continuous phase. In this report, inspired by Goldstein’s branch cut phase unwrapping algorithm, we formulate this sign estimation problem as a binary optimization problem, and propose a branch cut type algorithm for solving the optimization problem. Numerical experiments show the effectiveness of the proposed sign estimator compared with a state-of-the-art estimator.

Key Words: Fringe projection, 3D measurement, Fringe analysis, Sign ambiguity resolution, Branch cut type algorithm.

1 Introduction

Fringe projection is a major technique to obtain three-dimensional (3D) surface information of objects in a non-contact manner^{1)–3)}, and widely used in biomedical^{4)–6)}, industrial^{7)–9)}, kinematics^{10), 11)}, and biometric^{12), 13)} applications. A typical fringe projection profilometry system is illustrated in Fig. 1. It consists of a projector, a camera and a digital computer. First, the projector projects sinusoidal fringe patterns onto an object. Second, the camera records images of the fringe patterns which are distorted due to the surface profile of the object. Third, from the recorded images, the digital computer estimates the continuous phase distribution which corresponds to the horizontal projector pixels by using some fringe analysis composed of *wrapped phase detection* and *phase unwrapping* steps. Finally, a 3D surface is computed from the camera pixels and the projector pixels on the basis of triangulation.

A most popular fringe projection technique is the following *three-step phase-shifting method*¹⁴⁾ because it can obtain 3D information stably from only three simple fringe patterns. Three different fringe images I_k ($k = 1, 2, 3$), whose phases are shifted by $2\pi/3$ from each other, are recorded on two-dimensional lattice points $(x, y) \in \mathcal{L}$ as

$$\left. \begin{aligned} I_1(x, y) &= a(x, y) + b(x, y) \cos(\phi(x, y)) + n_1(x, y) \\ I_2(x, y) &= a(x, y) + b(x, y) \cos(\phi(x, y) - \frac{2\pi}{3}) + n_2(x, y) \\ I_3(x, y) &= a(x, y) + b(x, y) \cos(\phi(x, y) + \frac{2\pi}{3}) + n_3(x, y) \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

where \mathcal{L} is the set of all lattice points captured by the camera, a is a slowly varying background illumination, b is the fringe amplitude that is also a low-frequency signal, ϕ is the continuous phase distribution (the so-called *unwrapped phase*) to be estimated, and n_k ($k = 1, 2, 3$) are independent additive noises. The noisy *wrapped phase*

$$\phi^W(x, y) := W(\phi(x, y) + \nu(x, y)) \in (-\pi, \pi] \quad (2)$$

is computed from $\cos(\phi^W) = \frac{2I_1 - I_2 - I_3}{\sqrt{(2I_1 - I_2 - I_3)^2 + 3(I_2 - I_3)^2}}$

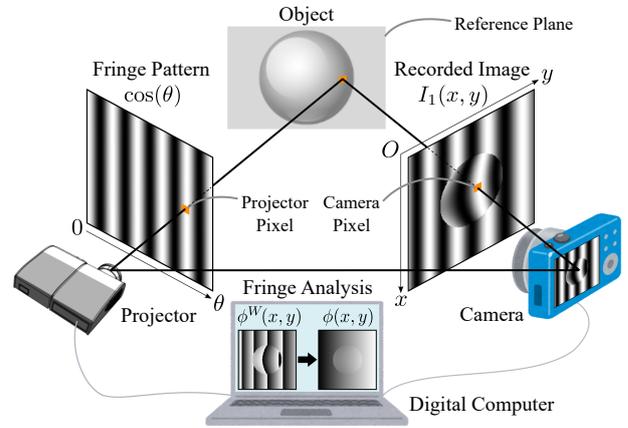


Fig. 1: Typical fringe projection profilometry system

and $\sin(\phi^W) = \frac{\sqrt{3}(I_2 - I_3)}{\sqrt{(2I_1 - I_2 - I_3)^2 + 3(I_2 - I_3)^2}}$, where $\nu \in (-\pi, \pi]$ is phase noise and $W: \mathbb{R} \rightarrow (-\pi, \pi]$ is defined by $\forall \varphi \in \mathbb{R} \exists \eta \in \mathbb{Z} \quad \varphi = W(\varphi) + 2\pi\eta$ and $W(\varphi) \in (-\pi, \pi]$. ϕ is estimated from ϕ^W by using some two-dimensional phase unwrapping algorithm^{15)–18)}, and 3D information is obtained from the camera pixel $(x, y) \in \mathcal{L}$ and the horizontal projector pixel $\theta = \phi(x, y)$ by using triangulation.

However, the phase-shifting method requires that the physical quantities a , b and ϕ remain constant during the time needed to record the images I_k ($k = 1, 2, 3$), i.e., a , b and ϕ must be common for all indices $k = 1, 2, 3$ in (1). This condition is not satisfied when transient phenomena are measured¹⁹⁾ or the environment is hostile. To deal with such situations, reconstruction of ϕ from a single fringe image I_1 in (1) is studied, and several phase recovery algorithms have been proposed^{19)–25)}. These algorithms usually use a high pass filter²⁰⁾ to remove the background illumination a , and then use Hilbert transform²⁶⁾ to normalize the fringe amplitude b . As a result, from I_1 in (1), we can obtain the normalized fringe image

$$I(x, y) = \cos(\phi(x, y) + \nu(x, y)) \in [-1, 1]. \quad (3)$$

From (2) and (3), the absolute value of the wrapped phase is computed as

$$|\phi^W(x, y)| = \arccos(I(x, y)) \in [0, \pi].$$

From $\phi^W(x, y) \in (\pi, \pi]$, we have $\phi^W(x, y) = |\phi^W(x, y)|$ if $|\phi^W(x, y)| = 0$ or $|\phi^W(x, y)| = \pi$, and

$$\phi^W(x, y) = \text{sgn}(\phi^W(x, y))|\phi^W(x, y)| \quad (4)$$

otherwise, where $\text{sgn}(x) := +1$ for $x \geq 0$ and $\text{sgn}(x) := -1$ for $x < 0$. Therefore, in order to compute $\phi^W(x, y)$ for all $(x, y) \in \mathcal{L}$, we have to resolve sign ambiguity in (4).

In this report, on the basis of the discussions in [18], we introduce a minimization problem for the approximated energy of local change of ϕ so that we use a minimizer of the cost function for determination of $\text{sgn}(\phi^W(x, y))$ (see Section 2). For solving this minimization problem, we propose a branch cut type algorithm in Section 3. The word “branch cut type” means that the proposed method consists of steps similar to the steps used in Goldstein’s branch cut¹⁷⁾, which is a famous two-dimensional phase unwrapping algorithm. Finally, numerical experiments in Section 4 demonstrate the effectiveness of the proposed method compared with the existing method in [23].

2 Minimization of Energy of Local Change for Sign Ambiguity Resolution

Let $\mathcal{L} := \{(x_i, y_j)\}_{j=1,2,\dots,n}^{i=1,2,\dots,m}$ s.t. $x_1 < x_2 < \dots < x_m$ and $y_1 < y_2 < \dots < y_n$, and let $\Omega := [x_1, x_m] \times [y_1, y_n]$.

By assuming that the normalized image I is noise-free, i.e., $\nu(x, y) = 0$ in (3), the relation between the image gradient $\nabla I(x, y) := (\frac{\partial I}{\partial x}(x, y), \frac{\partial I}{\partial y}(x, y))^T$ and the phase gradient $\nabla \phi(x, y) := (\frac{\partial \phi}{\partial x}(x, y), \frac{\partial \phi}{\partial y}(x, y))^T$ is deduced as

$$\nabla I(x, y) = -\sin(\phi(x, y))\nabla \phi(x, y).$$

As shown above, the orientation of $\nabla \phi(x, y)$ is the same as or opposite to that of $\nabla I(x, y)$ depending on $s(x, y) := \text{sgn}(W(\phi(x, y))) = \text{sgn}(\sin(\phi(x, y)))$. Moreover, on the basis of the idea of *functional data analysis*^{18), 27)}, by trying to minimize the energy of local change of ϕ (defined as the L_2 -norm of the second order partial derivative of ϕ):

$$\begin{aligned} & \iint_{\Omega} \left[\left| \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right|^2 + 2 \left| \frac{\partial^2 \phi}{\partial x \partial y} \right|^2 + \left| \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \right|^2 \right] dx dy \\ & \approx \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} \|\nabla \phi(x_i, y_{j+1}) - \nabla \phi(x_i, y_j)\|^2 \\ & \quad + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n \|\nabla \phi(x_{i+1}, y_j) - \nabla \phi(x_i, y_j)\|^2, \end{aligned}$$

we introduce the following optimization problem, which is similar to that proposed in [19] for estimation of $s(x_i, y_i)$.

Problem 1 (Approximated energy minimization problem)

Find $\mathbf{S}^* := (s_{i,j}^*) \in \{-1, +1\}^{m \times n}$ minimizing

$$\begin{aligned} J(\mathbf{S}) := & \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} \|s_{i,j+1} \mathbf{v}_{i,j+1} - s_{i,j} \mathbf{v}_{i,j}\|^2 \\ & + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n \|s_{i+1,j} \mathbf{v}_{i+1,j} - s_{i,j} \mathbf{v}_{i,j}\|^2, \quad (5) \end{aligned}$$

where $\mathbf{v}_{i,j} := \frac{\nabla I(x_i, y_j)}{\|\nabla I(x_i, y_j)\|}$ ($i = 1, 2, \dots, m$ and $j = 1, 2, \dots, n$) are the normalized image gradient vectors at (x_i, y_j) , and $\nabla I(x_i, y_j)$ are approximately computed by applying, e.g., the Prewitt or the Sobel operator, to I in (3).

After finding a minimizer $\mathbf{S}^* = (s_{i,j}^*) \in \{-1, +1\}^{m \times n}$, the wrapped phase ϕ^W at $(x_i, y_j) \in \mathcal{L}$ is estimated by

$$\phi^W(x_i, y_j) = \begin{cases} 0 & \text{if } |\phi^W(x_i, y_j)| = 0; \\ \pi & \text{if } |\phi^W(x_i, y_j)| = \pi; \\ s_{i,j}^* |\phi^W(x_i, y_j)| & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Remark 1 There are at least two minimizers of (5) because $J(\mathbf{S}) = J(-\mathbf{S})$ for any $\mathbf{S} \in \{-1, +1\}^{m \times n}$. Actually, we need other information to judge which minimizer should be used for the above wrapped phase estimation.

3 Branch Cut Type Sign Estimator

3.1 Transformation of Problem 1 to Another Problem

Let $J_{i,j}^h(s_{i,j}, s_{i,j+1}) := \|s_{i,j+1} \mathbf{v}_{i,j+1} - s_{i,j} \mathbf{v}_{i,j}\|^2$ and $J_{i,j}^v(s_{i,j}, s_{i+1,j}) := \|s_{i+1,j} \mathbf{v}_{i+1,j} - s_{i,j} \mathbf{v}_{i,j}\|^2$ in (5). Then $J_{i,j}^h$ and $J_{i,j}^v$ depend only sign changes between neighboring pairs $(s_{i,j}, s_{i,j+1})$ and $(s_{i,j}, s_{i+1,j})$, respectively. For a sign matrix $\mathbf{S} = (s_{i,j}) \in \{-1, +1\}^{m \times n}$, we define sign change matrices $\mathbf{C}_h = (c_{i,j}^h) \in \{0, 1\}^{m \times (n-1)}$ and $\mathbf{C}_v = (c_{i,j}^v) \in \{0, 1\}^{(m-1) \times n}$ as

$$c_{i,j}^h := \begin{cases} 0 & \text{if } s_{i,j+1} = s_{i,j}; \\ 1 & \text{if } s_{i,j+1} = -s_{i,j}, \end{cases} \quad (6)$$

and

$$c_{i,j}^v := \begin{cases} 0 & \text{if } s_{i+1,j} = s_{i,j}; \\ 1 & \text{if } s_{i+1,j} = -s_{i,j}. \end{cases} \quad (7)$$

Moreover, by defining new cost functions $\hat{J}_{i,j}^h: \{0, 1\} \rightarrow \mathbb{R}_+$ and $\hat{J}_{i,j}^v: \{0, 1\} \rightarrow \mathbb{R}_+$ as

$$\begin{cases} \hat{J}_{i,j}^h(0) := J_{i,j}^h(+1, +1) = J_{i,j}^h(-1, -1); \\ \hat{J}_{i,j}^h(1) := J_{i,j}^h(+1, -1) = J_{i,j}^h(-1, +1), \end{cases}$$

and

$$\begin{cases} \hat{J}_{i,j}^v(0) := J_{i,j}^v(+1, +1) = J_{i,j}^v(-1, -1); \\ \hat{J}_{i,j}^v(1) := J_{i,j}^v(+1, -1) = J_{i,j}^v(-1, +1), \end{cases}$$

Problem 1 can be replaced with Problem 2 below.

Problem 2 (Alternative expression of Problem 1) Find $(\mathbf{C}_h^*, \mathbf{C}_v^*) \in \{0, 1\}^{m \times (n-1)} \times \{0, 1\}^{(m-1) \times n}$ minimizing

$$\hat{J}(\mathbf{C}_h, \mathbf{C}_v) := \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{n-1} \hat{J}_{i,j}^h(c_{i,j}^h) + \sum_{i=1}^{m-1} \sum_{j=1}^n \hat{J}_{i,j}^v(c_{i,j}^v) \quad (8)$$

subject to

$$c_{i,j}^h \oplus c_{i,j+1}^v \oplus c_{i+1,j}^h \oplus c_{i,j}^v = 0 \quad (9)$$

for all $i = 1, 2, \dots, m-1$ and $j = 1, 2, \dots, n-1$, where \oplus denotes the exclusive disjunction, i.e., $0 \oplus 0 = 1 \oplus 1 = 0$ and $0 \oplus 1 = 1 \oplus 0 = 1$ hold.

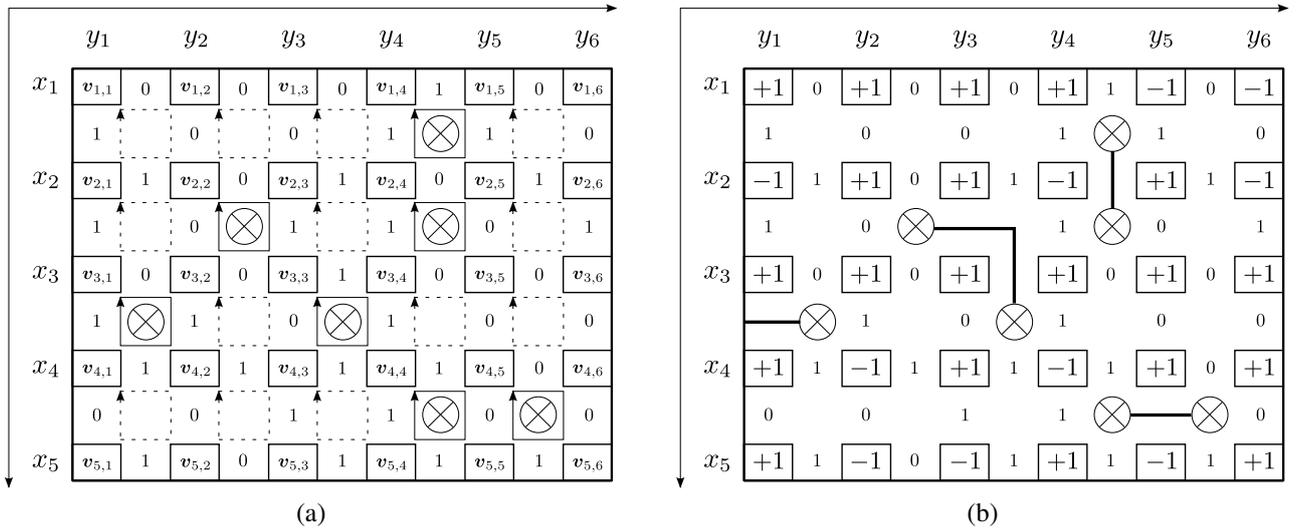


Fig. 2: Illustration of the idea of the proposed branch cut type sign estimator: (a) detection of every closed loop satisfying (10) by using the locally ideal sign changes $c_{i,j}^{h,\min}$ and $c_{i,j}^{v,\min}$ computed from $v_{i,j}$ ($i = 1, 2, \dots, 5$ and $j = 1, 2, \dots, 6$) and (b) constructions of branches, sign changes $c_{i,j}^h$ and $c_{i,j}^v$, and corresponding signs $s_{i,j}$ ($i = 1, 2, \dots, 5$ and $j = 1, 2, \dots, 6$).

3.2 Branch Cut Type Algorithm for Solving Problem 2

To minimize (8) under condition (9), we propose the following branch cut type algorithm, which consists of steps similar to *residue detection*, *branch construction* and *path integration* steps in Goldstein's branch cut¹⁷⁾ for two-dimensional phase unwrapping. In what follows, assume that $\hat{J}_{i,j}^h(0) \neq \hat{J}_{i,j}^h(1)$ and $\hat{J}_{i,j}^v(0) \neq \hat{J}_{i,j}^v(1)$ for all i and j .

1. Define $c_{i,j}^{h,\min} := \operatorname{argmin}_{c \in \{0,1\}} \hat{J}_{i,j}^h(c)$ and $c_{i,j}^{v,\min} := \operatorname{argmin}_{c \in \{0,1\}} \hat{J}_{i,j}^v(c)$ as *locally ideal sign changes*. Detect every closed loop $((x_i, y_j) \rightarrow (x_i, y_{j+1}) \rightarrow (x_{i+1}, y_{j+1}) \rightarrow (x_{i+1}, y_j) \rightarrow (x_i, y_j))$ satisfying

$$c_{i,j}^{h,\min} \oplus c_{i,j+1}^{v,\min} \oplus c_{i+1,j}^{h,\min} \oplus c_{i,j}^{v,\min} = 1. \quad (10)$$

Mark the center of such a closed loop (see Fig. 2(a)).

2. Create *branches* as shown in Fig. 2(b). Each branch is defined as a path connecting two centers marked in the first step, or a path connecting one center marked in the first step and the outside of the image. Then we can construct sign change matrices C_h and C_v satisfying condition (9) by defining

$$c_{i,j}^h := \begin{cases} c_{i,j}^{h,\min} \oplus 1 & \text{if } \begin{cases} (x_i, y_j) \text{ and } (x_i, y_{j+1}) \\ \text{lie on the left and right} \\ \text{sides of some branch;} \end{cases} \\ c_{i,j}^{h,\min} & \text{otherwise,} \end{cases}$$

and

$$c_{i,j}^v := \begin{cases} c_{i,j}^{v,\min} \oplus 1 & \text{if } \begin{cases} (x_i, y_j) \text{ and } (x_{i+1}, y_j) \\ \text{lie on the upper and lower} \\ \text{sides of some branch;} \end{cases} \\ c_{i,j}^{v,\min} & \text{otherwise,} \end{cases}$$

3. Construct a sign matrix S corresponding to the sign change matrices C_h and C_v defined in the second step, by using relations (6) and (7) (see Fig. 2(b)).

4 Numerical Experiments

We compare the effectiveness of the proposed sign estimator with that of the existing algorithm in [23] for two objects shown in Figs. 3(a) and 4(a). In both experiments, we set $\mathcal{L} := \{(x_i, y_j)\}_{i=1,2,\dots,256}^{j=1,2,\dots,256}$, and set $a(x, y) = 1$, $b(x, y) = 2$, and $n_1(x, y) = 0$ for all $(x, y) \in \mathcal{L}$ in (1). We generate the normalized fringe image $I(x, y)$ ($(x, y) \in \mathcal{L}$) by subtracting $\frac{1}{65536} \sum_{i=1}^{256} \sum_{j=1}^{256} I_1(x_i, y_j)$ from $I_1(x, y)$ followed by the normalization into $[-1, 1]$.

Figure 3(b) shows¹ the normalized fringe image $I(x, y)$ ($(x, y) \in \mathcal{L}$) based on the object in Fig. 3(a). Figure 3(c) shows the true sign $s(x, y) = \operatorname{sgn}(W(\phi(x, y)))$, to be estimated (see Section 2), of the noiseless wrapped phase $W(\phi(x, y))$ in Fig. 3(f). Figures 3(d) and 3(g) respectively depict the sign and the wrapped phase estimated by the algorithm in [23] using the parameters $\mu = 1$ and $\Gamma = 11$. Figures 3(e) and 3(h) respectively depict the sign and the wrapped phase estimated by the proposed method, where we construct branches by repeatedly connecting the closest pair of centers of closed loops satisfying (10). From these figures, we observe that the proposed branch cut type sign estimator achieves lower error rate ($\frac{190}{65536} \approx 0.29\%$) compared with the existing algorithm in [23] ($\frac{1053}{65536} \approx 1.61\%$) especially around the edges of the object.

Figure 4(b) shows $I(x, y)$ for the other object ("teapot" provided in MATLAB®) in Fig. 4(a). Figure 4(c) shows the sign $s(x, y)$ of $W(\phi(x, y))$ in Fig. 4(f). Figures 4(d) and 4(g) depict the sign and the wrapped phase estimated by the algorithm in [23]. Figures 4(e) and 4(h) depict the sign and the wrapped phase estimated by the proposed method. In this experiment, the proposed sign estimator achieves again lower error rate ($\frac{141}{65536} \approx 0.22\%$) compared with the existing algorithm in [23] ($\frac{1167}{65536} \approx 1.26\%$).

Acknowledgment This work was supported in part by JSPS Grants-in-Aid (26-920) and (B-15H02752).

¹For each image in Figs. 3(b)–3(h) and 4(b)–4(h), the sample values in $[\text{Min}, \text{Max}]$ on \mathcal{L} are rescaled into $[0$ (black), 255 (white)].

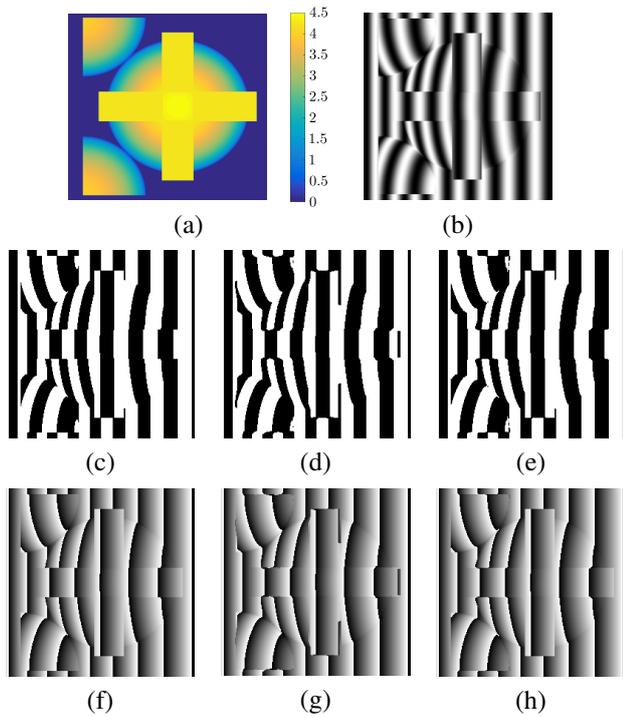


Fig. 3: Experimental results (I): (a) object, (b) $I(x, y)$, (c) $s(x, y) = \text{sgn}(W(\phi(x, y)))$ (to be estimated), (d) signs estimated by [23], (e) signs estimated by the proposed method, (f) $W(\phi(x, y))$, (g) $\phi^W(x, y)$ based on the signs in (d), and (h) $\phi^W(x, y)$ based on the signs in (e).

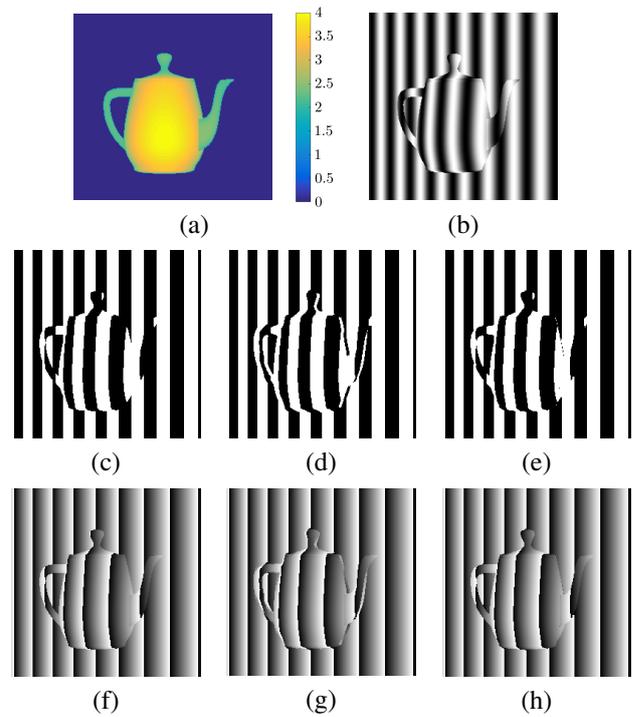


Fig. 4: Experimental results (II): (a) object, (b) $I(x, y)$, (c) $s(x, y) = \text{sgn}(W(\phi(x, y)))$ (to be estimated), (d) signs estimated by [23], (e) signs estimated by the proposed method, (f) $W(\phi(x, y))$, (g) $\phi^W(x, y)$ based on the signs in (d), and (h) $\phi^W(x, y)$ based on the signs in (e).

References

- 1) D. Malacara: *Optical Shop Testing*, 3rd ed, Wiley (2007)
- 2) S. S. Gorthi and P. Rastogi: Fringe projection techniques: Whither we are?, *Opt. Lasers Eng.*, **48-2**, 133/140 (2010)
- 3) S. Zhang: Recent progresses on real-time 3D shape measurement using digital fringe projection techniques, *Opt. Lasers Eng.*, **48-2**, 149/158 (2010)
- 4) F. Lilley, M. J. Lalor, and D. R. Burton: Robust fringe analysis system for human body shape measurement, *Opt. Eng.*, **39-1**, 187/195 (2000)
- 5) L. C. Chen and C. C. Huang: Miniaturized 3D surface profilometer using digital fringe projection, *Meas. Sci. Technol.*, **16-5**, 1061/1068 (2005)
- 6) K. Genovese and C. Pappalètere: Whole 3D shape reconstruction of vascular segments under pressure via fringe projection techniques, *Opt. Lasers Eng.*, **44-12**, 1311/1323 (2006)
- 7) M. de Angelis, D. de Nicola, P. Ferraro, A. Finizio, and G. Pierattini: Liquid refractometer based on interferometric fringe projection, *Opt. Commun.*, **175-4-6**, 315/321 (2000)
- 8) C. Quan, C. J. Tay, X. Y. He, X. Kang, and H. M. Shang: Microscopic surface contouring by fringe projection method, *Opt. Lasers Eng.*, **34-7**, 547/552 (2002)
- 9) J. Burke, T. Bothe, W. Osten, and C. F. Hess: Reverse engineering by fringe projection, *Proc. SPIE*, **4778**, 312/324 (2002)
- 10) S. Tan, D. Song, and L. Zeng: Tracking fringe method for measuring the shape and position of a swimming fish, *Opt. Commun.*, **173-1-6**, 123/128 (2000)
- 11) F. Yuan, D. Song, L. Zeng: Measuring 3D profile and position of a moving object in large measurement range by using tracking fringe pattern, *Opt. Commun.*, **196-1-6**, 85/91 (2001)
- 12) J. Yagnik, G. S. Siva, K. R. Ramakrishnan, and L. K. Rao: 3D shape extraction of human face in presence of facial hair: A profilometric approach, *Proc. IEEE TENCON*, 1/5 (2005)
- 13) S. Huang, Z. Zhang, Y. Zhao, J. Dai, C. Chen, Y. Xu, E. Zhang, L. Xie: 3D fingerprint imaging system based on full-field fringe projection profilometry, *Opt. Lasers Eng.*, **52**, 123/130 (2014)
- 14) K. Creath: Phase-measurement interferometry techniques, *Prog. Opt.*, **26**, 349/393 (1988)
- 15) D. C. Ghiglia and M. D. Pritt: *Two-Dimensional Phase Unwrapping: Theory, Algorithms, and Software*, Wiley (1998)
- 16) L. Ying: Phase unwrapping, *Wiley Encyclopedia of Biomedical Engineering, 6-Volume Set*, Wiley (2006)
- 17) R. M. Goldstein, H. A. Zebker, and C. L. Werner: Satellite radar interferometry: Two-dimensional phase unwrapping, *Radio Sci.*, **23-4**, 713/720 (1988)
- 18) D. Kitahara and I. Yamada: Algebraic phase unwrapping based on two-dimensional spline smoothing over triangles, *IEEE Trans. Sig. Process.*, **64-8**, 2103/2118 (2016)
- 19) D. Wu and K. L. Boyer: Sign ambiguity resolution for phase demodulation in interferometry with application to pre-lens tear film analysis, *Proc. IEEE CVPR*, 2807/2814 (2010)
- 20) M. Servin, J. L. Marroquin, and F. J. Cuevas: Demodulation of a single interferogram by use of a two-dimensional regularized phase-tracking technique, *Appl. Opt.*, **36-19**, 4540/4548 (1997)
- 21) J. A. Quiroga, M. Servin, and F. J. Cuevas: Modulo 2π fringe orientation angle estimation by phase unwrapping with a regularized phase tracking algorithm, *J. Opt. Soc. Am. A*, **19-8**, 1524/1531 (2002)
- 22) C. J. Tay, C. Quan, F. J. Yang, and X. Y. He: A new method for phase extraction from a single fringe pattern, *Opt. Commun.*, **239-4-6**, 251/258 (2004)
- 23) J. Villa, I. De la Rosa, G. Miramontes, and J. A. Quiroga: Phase recovery from a single fringe pattern using an orientational vector-field-regularized estimator, *J. Opt. Soc. Am. A*, **22-12**, 2766/2773 (2005)
- 24) H. Wang and Q. Kemao: Frequency guided methods for demodulation of a single fringe pattern, *Opt. Express*, **17-17**, 15118/15127 (2009)
- 25) C. Tian, Y. Yang, D. Liu, Y. Luo, and Y. Zhuo: Demodulation of a single complex fringe interferogram with a path-independent regularized phase-tracking technique, *Appl. Opt.*, **49-2**, 170/179 (2010)
- 26) J. A. Quiroga, J. A. Gómez-Pedrero, and Á. García-Botella: Algorithm for fringe pattern normalization, *Opt. Commun.*, **197-1-3**, 43/51 (2001)
- 27) J. O. Ramsay and B. W. Silverman: *Functional Data Analysis*, Springer (2005)

判別分析の新理論と遺伝子解析

新村秀一(成蹊大学)

New Theory of Discriminant Analysis and Gene Analysis

Shuichi Shinmura (Seikei University)

Abstract- We developed the new theory of discriminant analysis after R.Fisher. Over than ten years, many researchers are struggling in the high-dimension gene analysis. This theory analyzes six microarray data sets very easy and finds the data consists of several small gene spaces. We can analyze these small subspaces by the ordinal statistical approach, very easy.

1. はじめに

本研究では、整数計画法(IP)を用いて1997年から行ってきた「新しい判別分析の理論(以下、新理論)」と2015年末に僅か41日で15編のフリーペーパーで確立した「Matroska Feature Selection Method for Microarray Data(新手法2)」の概略を紹介する[50, 76]。2015年にいつ終わるか分からない一生の研究テーマが「小標本のための100重交差検証法(新手法1)[27, 72]」で判別係数の95%信頼区間(CI)の解釈がうまくいってほぼ終了した[51, 52]。しかし、世界にそれを認めさすにはインパクトに弱かった。2015年10月末に富山で開催された研究集会でその発表を行った。そこで筑波大学の院生が、公開されているMicroarrayデータ(以下、データ)の主成分分析の発表を行った。翌々日に6種類の公開データ[11]を分析して、自分の新理論が遺伝子の変数選択に最適ことが分かった[34-49]。筆者の開発した整数計画法[75]による**最小誤分類数**(Minimum Number of Misclassification, Minimum NM, **MNM**)基準による**改定IP-OLDF**だけが[18-26, 68-71]、数千から数万の遺伝子情報を変数とする判別分析で、数十個の判別係数だけが0でなく残り全てが0になり自然に変数選択(feature selection)が行えることが分かった。ここで、線形分離可能な空間(**LSD**)もしくは部分空間を全て**Matroska**と呼ぶ。いまデータは n 件* p 変数($n \ll p$)とすると、 p 変数の最大のMatroskaに $(p-1)$ 変数以下の小さなMatroskaを含む**構造**になっていることが分かった。すなわち p -高次元の遺伝子空間から、数十変数(遺伝子)の小さな部分空間が選ばれる。さらにそれを判別すると、より小さな部分空間になる。より小さな部分空間にならないところで停止し、これを**Small Matroska(SM)**と呼ぶことにする。SVM[60]やFisherの線形判別関数(**LDF**)は、次元の縮小ができないことが分かった。特に変数選択をしないで判別分析するだけでそれが行える唯一の判別手法を提案したことになる。そして、線形分離可能なデータ(**LSD**)は、**MNM** = 0と等値になるが、その中に幾つものMNM

= 0になる部分空間を入れ子状に含んでいる。一番小さな k 次元のMatroskaをBasic Gene Subspace(**BGS**)と呼ぶことにする。さらにデータは、数十個のSMと $MNM \geq 1$ 以上の多次元の部分空間の排他的な和集合であることが分かった。十年以上に渡り多くの統計家が多次元データ解析と銘柄打ち研究してきたが、大きな成果を得られなかった。その中でJeffery[11]は11個のFeature Selectionを具体的に提案してデータで検証しているが結果は明確でない。一方多くの研究者が近年Lasso[56]研究に注目しているが、すでに筆者が具体的な結果を出したので、6種のデータと、スイス銀行紙幣データ[6, 51]、48車種の日本車データ[52]を用いて比較検証することを勧めたい。恐らく、データが複数の排他的なSMの和集合という結論は得られないと考える。

SMはほぼ100件*100個以下の変数(遺伝子)という小標本であり、簡単に統計分析できる。またMatroskaに含まれる一番小さな**BGS**が分かれば、データの**Matroska**構造が完全に記述できる。すなわち、将来癌の遺伝子を修復する技術が確立されれば、これらの**BGS**を直接修復すればよいであろう。あるいは、薬や放射線療法で延命した患者と効果のなかった患者の**BGS**を比較することで、治療の効果判定できる。2015年まで一般的なデータで、改定IP-OLDFの検証標本の平均誤分類確率(**M2**)が他の判別関数より優れていることを示してきたがインパクトに弱かった。しかし、遺伝子解析は改定IP-OLDFでしか分析できない。数年後に判別分析の新理論と2個の新手法が世界的に認められればと願っている。

詳しくは、本年末に刊行予定の”New Theory of Discriminant Analysis after R.Fisher[50]”を参照してほしい。

2. 判別分析の新理論

筆者が開発した判別分析の新理論とは、整数計画法(IP)を用いた**MNM**基準に基づく**IP-OLDF**と**改定IP-**

OLDF, 線形計画法(LP)による改定 LP-OLDF とそれらの組み合わせの改定 IPLP-OLDF [29, 70] の数理計画法(MP)による4つのLDFである。IP-OLDFで定義された判別係数の空間上で判別関数とNMの関係が分かった。改定IP-OLDFは問題1と問題2, 新手法1は問題4, そして分散共分散行列の一般化逆行列の瑕疵の問題3を解決した[28, 32]。Fisherは計算機環境のない時代に対象とする現象を正規分布と仮定し判別分析の理論を定式化し, 多くの分野に適用された。このことを筆者は感謝している。しかし, 計算機環境とソフトが充実した現在, 実際の研究対象に目をつむり楽であるからといって正規分布を大前提として研究を進めることには問題があると考えている。

2.1 4個の問題と2個の新知見

Fisherは, 分散共分散行列に基づいてFisherのLDFを提案し, 判別分析の理論を確立した[4, 5]。しかし, 判別分析には4個の重要な問題があるので, 改定IP-OLDFを開発した[24-27]。これは, MNM基準に基づいて誤分類数を最小にし, 判別係数空間上で定義した最適凸体(optimal convex polyhedron, OCP)の内点に対応する判別係数を直接求めている。これまで見つけた主要な問題点は次の通りである。

問題1 : p 変数の $f(\mathbf{x}_i)$ を任意のLDFとする。判別規則は非常に簡単で, 拡張された判別スコア ($y_i^* f(\mathbf{x}_i) > 0$) が正であればケース \mathbf{x}_i が正しく分類され, 負 ($y_i^* f(\mathbf{x}_i) < 0$) であれば \mathbf{x}_i が誤分類される。この判別規則に等号が入る余地はない。すなわち判別超平面上のケースをいずれの群に判別するかは未解決の問題である。2010年に基礎研究を終えて日科技連出版から『最適線形判別関数[72]』を出版した後, 周りの統計研究家にこの点をどう考えるか調査した。群1に含めることに何ら問題を感じていない多くの研究者から, 実に様々な間違っただ他の考え方があることを知って驚愕した。帰無仮説などの非常に難しい論理を操る統計家が, なぜ非論理的な間違いを判別分析で行ってきたのか疑問である。この問題は, ケースの値を線形超平面の係数として, 判別係数の空間でIP-OLDFを定義すると, 有限個の凸体(CP)に分割できる。凸体の内点に対応したLDFは $NM = k$ 個の同じケースを誤分類し, 凸体の頂点や辺に対応したLDFは必ず q 個以上のケースが判別超平面上にくるので, 統計ソフトの出力する誤分類数を最大 $(k+q)$ まで増やす必要がある。また凸体は有限個なので, 必ず最小のNMすなわちMNMを持つOCPがある。この凸体の頂点を求めるIP-OLDFは, データが一般位置にない場合は正しいOCPを求めないことが分かった。そこで内点を直接求める改定IP-OLDFを提案し, Fisher以降の新しい判別理論の中核とした。またMNM

は単調減少性 ($MNM_k \geq MNM_{(k+1)}$) があり, フルモデルが必ず最小になるので学習標本ではMNMをモデル選択に使えないが, $MNM_k = 0$ になれば, この k 個の変数を含む全てのモデルが線形分離可能になるという重要な事実が分かった。この事実に満足し, 線形分離可能なデータ(LSD)はMatroska構造をもつことを見逃していた。これが, 応用研究としての「遺伝子解析」のポイントである。

問題2 : Vapnikは, ハードマージン最大化SVM(H-SVM), ソフトマージン最大化SVM(S-SVM)およびカーネルSVMを提案した。H-SVMはLSDを明確に示したが, “ $MNM = 0$ ”でもってLSDを明確に定義できる。多くの研究者は, 「判別分析の目的はLSDの判別でなく, 重複データを判別することである」と主張している。しかし, LDFの世界で“ $MNM > 1$ ”で初めて重複データを定義できるので, この主張は完全に間違っている。すなわちLSDの判別研究は, 2010年以降の応用研究で筆者が初めて行い, ほぼ2015年末に漸く完成した。なぜ研究が行われなかったかの理由は,

1) H-SVMはLSD以外のデータに適用できないので, 誰も実際の判別に利用しなかった。

2) IP-OLDFでスイス銀行がLSDであることが分かったのは, 63個全ての判別モデル[9]を改定IP-OLDFで検討することで初めて分かった。

3) 研究に用いているデータからLSDを探すためには, 上記のように63個全ての判別モデルを検討する必要がある。このようなアプローチをとっているのは, 分析作業が大変なので筆者しかいない。しかし試験の合否判定を大門4問の得点合計が50点以上を合格とした場合, $f = T1+T2+T3+T4-50$ という自明なLDFがあり, $f \geq 0$ であれば合格, $f < 0$ であれば不合格と判定できる[33]。等号を含めることができるのは, 説明変数で判別規則が記述できるからである。しかしLDFや2次判別関数(QDF)で合否判定が行えないことが簡単に分かった[74]。この他, 2群の平均値を拡大してLSDのデータを簡単に作り出せることを示した。

問題3 : 問題3は, JMP[16]のQDFと正則化判別分析(RDA)[13]が用いている一般化逆行列の欠陥である。2013年に一つの群に属する変数値が一定であり, 他群の値が変化した場合, QDFはクラス1に属する全てのケースをクラス2に誤分類することが分かった。しかし一定値に小さな乱数を加えることで問題を解決できる。この経験から正則化技術の応用であるLASSOが遺伝子の変数選択でうまくいかないと考えている。

問題4 : Fisherは, LDFの誤判別率と判別係数の標準誤差(SE)を定式化していないので, 判別分析は回帰分析のような推論手法ではない。そこでリサンプリング

と相互検証を用いた**新手法 1**を開発した[27, 30, 31].
 これで、筆者は検証標本における平均誤分類確率(M2)が最小のモデルを「**最適モデル**[51]」とするモデル選択を、一つとっておき法(L00)[12]に代わって提案した. 8個のLDFの**最適モデル**を比較すると、改定IP-OLDFは8個のLDFの中で多くの検証で最小になる. Vapnikは「サポートベクター間の距離の最大化は汎化能力を持っている」と主張しているが、**最適モデル**は非常に簡単に優れたモデル選択手法であり、選ばれたモデルは汎化能力があると考えられる. また8個のLDFのおおよその順位を得た: 改定IP-OLDF(と改定IPLP-OLDF), ロジスティック回帰, SVM4(C=10000), そしてFisherのLDFは最悪である. 改定LP-OLDFは**問題 1**に弱く, SVM1(C=1)は多くの場合でSVM4より劣っている.

2.2 検討する8個のLDF

本稿では、2個の統計的なLDFと6個のMPによるLDFを評価する. FisherのLDFと式(1)のロジスティック回帰はJMPで分析した. 日本SASインスティテュート社のJMP部門は、JMPスクリプトで**新手法 1**を実行するプログラムの作成をしてくれた. これらに加えて、QDFとRDAで教師データの判別を行なう.

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

p: the probability belongs to class1;
 x: the independent variables.

LINGO[17]で6個のMPによるLDFを分析した. 式(2)の**改定IP-OLDF**は、IPでMNMFを見つけることができる. **改定LP-OLDF**は、LPで定式化したL1ノルムLDFの一種であり、誤分類されるケースに限定して判別超平面からの距離の総和を最小化する. 式(2)で整数変数を非負の実数変数にかえると、改定IP-OLDFが改定LP-OLDFになる. **改定IPLP-OLDF**はMNMFの近似値を高速で探す[73]. しかし2012年以降は、IPソルバーの高速化で、改定IP-OLDFより遅くなった[29]. そして遺伝子解析のような高次元の分析で効果を発揮すると考えたが、データの分析は数秒で行え、また結果も改定IP-OLDFに劣っていることが分かった. 改定LP-OLDFで正しく判別されたケースを $e_i=0$ に固定し、誤判別されたケースだけに改定IP-OLDFを適用する混合モデルである.

$$\text{MIN} = \sum e_i; y_i * (\mathbf{x}_i \mathbf{b} + b_0) \geq 1 - M * e_i; \quad (2)$$

e_i : 0/1 integer decision variable;
 M: big M constant (M=10000);
 b_0 : free decision variables.

式(3)でVapnikはLSDの概念を明確に示すH-SVMを提案した. 今まで多くの研究者は、判別の目的は重複デー

タを判別することであると主張している. H-SVMと改定IP-OLDF以外のLDFは、LSDの判別を理論的に保証しないので、「オーバーラップ」または「オーバーラップしない」の状態を定義できない. すなわち「MNMF = 0」はLSDを意味し、「MNMF > 1」を2個のクラスが重なることを意味する.

$$\text{MIN} = \|\mathbf{b}\|^2 / 2; y_i * (\mathbf{x}_i \mathbf{b} + b_0) \geq 1; \quad (3)$$

$y_i = 1 / -1$ for $\mathbf{x}_i \in \text{class1/class2}$;
 \mathbf{x}_i : p-independent variables (p-variables);
 \mathbf{b} : p-discriminant coefficients;
 b_0 : the constant and free variable.

実際のデータはほとんどLSDでないため、式(4)のS-SVMが提案された. 「ペナルティc」は、2個の目的式を結合するが、正しい'c'を決定する規則がない. またRDAもパラメータをチューニングする必要がある. このような手法の利用は注意が必要である. 本研究では、SVM4(C=10000)とSVM1(C=1)の2個のS-SVMを検討する. 学習標本と検証標本の両方で、SVM4の平均誤分類確率(M1とM2)はSVM1より優れている. SVMは二次計画法(QP)で定式化される. 非線形計画(NLP)で定式化されるカーネルSVMはLDFでないので検討しない.

$$\text{MIN} = \|\mathbf{b}\|^2 / 2 + c * \sum e_i; y_i * (\mathbf{x}_i \mathbf{b} + b_0) \geq 1 - e_i; \quad (4)$$

c: penalty c;
 e_i : non-negative decision variable.

MPによるLDFの表記は似ているが、LP, QP, およびIPソルバーで結果が異なってくる[66]. また制約のあるなしに関係なく、MPソルバーで目的関数の最大値/最小値を求めることができるので数学ソフトで解けない関数の最大/最小が分かる. MPによる判別関数の多くの研究論文があるが、実データで評価しなかったため統計ユーザーは利用しなかった[10, 15]. 1997年以前のMPによる判別モデルを総括するStam論文[57]の後、MPによる判別関数の研究の第一段階が終了したと考えられる. これと並行して、Vapnikは実データによる検証を行い3つの異なるSVMモデルを統計とORでなくパターン認識の分野を中心に提案したのは賢明である. しかし筆者のように、8個の異なるLDFの比較を複数のデータを用いて100重交差検証法で体系的に行っていないと考えている.

2.3 新手法 1 と最適モデルの選択

問題 4の解決のため、**新手法 1**を提案した. これによって判別理論は伝統的な推測統計学でないが、その欠点を補うことができた. ロジスティック回帰は、Fisherの開発した最尤推定法で求めたヘシアン行列からロジスティック回帰係数のSEを出している. LSDの

判別では、推測計算が不安定になり、判別係数の SE は大きくなる。筆者は、これをロジスティック回帰は LSD を認識できたと拡大解釈している。小西ら(1992) は、Bootstrap 法で判別関数の誤分類確率の SE の式を求めている。しかし新手法 1 は、直接研究に用いているデータの個々の 95%信頼区間(confidence interval, CI)を求めている、実際のデータを分析したい研究者に便利である。これらのコンピューターを利用した方法は、確率分布から導かれた伝統的な推測統計学と一線を画すべきである。新手法 1 は以下の通りである。

新手法 1

- 1) 最初「 $K = 10$ 」にしていたが、95% CI を求めるために「 $k=100$ 」にした。元の標本を 100 回コピーし、検証標本として擬似母集団を生成する。
- 2) この標本に乱数を追加し、標本を昇順にソートする。この標本を 100 個に分割し 1 から 100 までの部分標本番号を追加する。
- 3) 100 個の部分標本を学習標本とし、擬似母集団を検証標本とする。この方法は、100 個の部分標本を擬似母集団からサンプリングしたのと同じ効果がある。一つの部分標本を学習標本とし、残り 99 個を検証標本とするような L00 法的な扱いは効果的でない。検証標本は擬似母集団であり、ユニークでなければならないと考えている。元の標本と擬似母集団は同じ分布なので多くの作業ミスを避けることができる。この手法 1 で、複数のデータで 8 個の LDF を比較し顕著な成果を得た。また、誤分類確率と判別係数の 95%CI を検討できた。用いたデータは、Fisher のアイリスデータ [3, 53]、CPD データ [14, 67, 78]、学生データ [71]、試験の 100 問と大門 4 問の 16 種の合否判定 [74]、スイス銀行紙幣データ [6]、日本車データ [51]、6 種のマイクロアレイデータ [11] である。スイス銀行紙幣データと日本車データで、改定 IP-OLDF が自然に高次元遺伝子空間を小さな部分空間に変数できることを確認している。これらのデータと分析結果は、この分野の研究者に良い検証データと結果の比較が行えるので、この分野の研究の進展に貢献すると考えている。

3. The Matroska Feature Selection Method for Microarray Data(新手法 2)

3.1 判別分析の新しい問題 5

これまで LSD の判別分析の研究はない。

- 1) 多くの統計学者は、LSD の判別が非常に容易であると誤解し、判別分析の目的は LSD でなく重複データを判別することと主張することが多い。しかし LSD と重複データは背反である。

2) H-SVM と改定 IP-OLD のみが理論的に LSD を認識でき、「 $MNM \geq 1$ 」という条件で重複データを定義できる。これができるのは H-SVM と改定 IP-OLDF だけである。

なぜこれまで LSD の判別研究がなかったかは、以下のよう考える。

- 1) Vapnik が H-SVM で LSD を明確に定義した。しかし、H-SVM は LSD の判別にしか使えないので、実際の判別分析に利用されなかった。
- 2) Vapnik は魅力的なカーネル SVM を提案し、ほとんどの研究者がこのモデルに注目し H-SVM に注目しなかった。
- 3) 研究データが LSD であるか否かは、改定 IP-OLDF で全てのモデルを検討する必要がある。
- 4) しかし Microarray データは LSD ではあるが、多分 H-SVM で Microarray データの判別の研究はなかった。そして多くの研究者は、10 年以上高次元空間の研究してきたが明確な結果が得られていない。改定 IP-OLDF だけが、高次元データの構造を容易に説明できる。すなわち 10 年以上解決できなかった問題 5 が、問題の提起と同時に解決できた。

3.2 新手法 2 の概略

近年、データを公開し、他の研究者が検証できる研究分野が増えてきているようだ。筆者自身、それらの情報を正しく把握していなかったため、2010 年に基礎研究を終えて応用研究として「試験の合否判定」で LSD の研究を性急に始めてしまった。その時点で、多くの研究者が遺伝子の判別を通常の判別手法で行おうとしていた。しかし、ケース数が 100 前後として、分析する遺伝子 (p 個) は 1 万を超えるものがざらである。ケース数が大規模であっても変数が少なければ、計算時間がかかるが従来の統計手法がそのまま利用できる。しかし遺伝子情報は高次元空間のデータとして多くの研究者が研究してきた。 $P=10,000$ とすれば相関係数を求めようとしても ${}_{1000}C_2 = 10000 * 9999 / 2 = 5000 * 9999$ 個ある。それ以前に、わずか 100 個のデータのばらつきから 10,000 個の分散共分散行列や相関行列を求めることは難しく、その研究が活発に行われていた。国際会議で、「Fisher の LDF は通常の判別でもうまくいかないのに、さらに不明確な分散共分散行列を求めた上で、通常の判別分析に持ち込むことは如何なものか？」と質問すると、いやな沈黙の洗礼を受けた。現時点で反省すれば「なぜ自分で具体的に検証しないで、試験データの応用研究を優先させたか」大いに後悔している。2015 年の 10 月 27 日に富山の科研費シンポジウムから帰った。翌 28 日に筑波大学の博士課程の石井さんから 6 個の Microarray データを掲載した HP [11] のメールを受け取った。早速ダウンロードすると 32bit の Excel では 3 個しか展開できない。

そこで一番小さな Alon らのデータ [1] を 8 個の LDF で判別した。MP による LSD は全て NM が 0 になり、これらのデータが癌と正常の 2 群がかなり離れていることが分かった。さらに驚くことに、改定 IP-OLDF の判別係数は多くが 0 であり僅か 72 個が 0 でなく自然に 2000 個の遺伝子から 72 個の遺伝子で MNM=0 と判別できることが分かった。改定 LP-OLDF と改定 IPLP-OLDF は、0 でないものが 100 変数以上と多い。しかし、H-SVM と S-SVM はほとんどが 0 でない。JMP で Fisher の LDF とロジスティック回帰で判別すると、分かっていたが Error で終了した。早速それを論文にまとめた。既存の媒体に発表を試みても掲載に時間がかかる。海外の学者は、フリーペーパーを発表している研究者も多い。そこで日時を明記して RG [77] に人生初のフリーペーパーを Upload した。翌日から Shipp ら [54] と Golub ら [8] の 7000 変数程度のデータを分析し、Alon の結果を再確認した [34-37]。さらに変数選択された遺伝子を用いて再度判別すると、より少ない遺伝子を選ばれた。そこで初めてデータは LSD であり、その中に MNM=0 になる部分空間が Matroska のように詰まっていることが分かった。2000 個の Alon のデータを Big Matroska と呼ぶことにした。その中に $(2^{2000}-1)$ 個のモデルが詰まっているが、MNM=0 になるものだけを Matroska と呼ぶ。なぜか 2000 個の遺伝子を持つ Big Matroska を判別すると、途中のより小さな Matroska を飛ばして 72 個の遺伝子を持つ小さな Matroska (SM) が出てきた。さらに判別すると、より小さな SM が現れる。しかし、3 回ほど行くとそれ以上小さな SM が得られない。これは、LINGO の IP ソルバーに用いている分枝限定法によるものと考えている。しかしこれが最小の Matroska (The Basic Gene Set, BGS) かどうか分からない。そこでやむを得ず、変数選択法あたりを付けて、全てのモデルで改定 IP-OLDF を用いて BGS を見つけた。念のため、元のデータから最初の SM に含まれる遺伝子を除外し、もう一度判別すると他の Matroska 構造が見つかった。すなわち**遺伝子データは線形分離可能な幾つかの SM の排他的な和集合と次元の大きな線形分離可能でない高次元空間の和集合**になっている。10 年以上に渡り多くの研究者が高次元データのまま分析していても何も成果が得られないのは、この特徴が理解されていないからである。そのうち、Jeffery から遺伝子解析用に開発した自分の製品の使用を薦めるメールが RG 経由で届いた。見てみると古色蒼然として具体的な変数選択に役に立たないので婉曲に断った。しかし、マニュアルでこの操作を継続しても幾つもの SM があるかを確認できないので LINGO で汎用モデルを開発した。また、64bit の MS/Office を購入し残りの 1 万個以上の Microarray データが扱えるようになった。11 月 10 日に六本木で JMP ユーザー

会に参加した。尊敬する Sall 博士が、講演で JMP12 で Microarray データが判別できる LDF を開発し、判別結果も報告された。筆者は興奮し、すでに LINGO で分析を行い成功していること。そして JMP12 を借用し検証してよい結果が得られれば購入すると約束した。翌日借用した JMP12 で分析しがつかりした。分かっていたが、誤分類確率が大きい。しかし一部 0 になるものもある。それを記述した論文を Upload するとともに、JMP に送った。ここで初めて、JMP の開発責任者 2 名が漸く筆者の RG に訪れた。そして借用期限の 1 か月前に 6 個すべてを判別すると、誤分類確率が 0 のものがなくなっていた。筆者の結果を見直して、瑕疵を修正したと考えられる。

表 1 は、LINGO の汎用モデルで分析した結果で、HP [11] からダウンロードした 6 個のデータの要約である。列の Description は 2 個のクラスの症例数を示す。Size はケース数と遺伝子の数で「SM : Gene」は「SM の数とそれに含まれる遺伝子総数である。完全な遺伝子名は、参照リストの論文にアップしてある。「Min, Mean, Max」は SM に含まれる遺伝子の最小値、平均値、最大値である。「JMP12」列は、Fisher の LDF による判別分析の 2×2 の分割表である。6 個の NM は、5, 3, 8, 3, 10 および 29 で、誤分類確率は大きい。Alon の最初の判別結果は NM=0 であったが、12 月 8 日に再計算すると 5 に代わっていた。**新手法 2** で幾つかの新しい用語、例えば「Matroska, Matroska 系列 (または Matroska 製品), 最小 Matroska (SM), 基本的な遺伝子の部分空間 (SGS)」を用いているが、ほとんどの人がこれらの用語を理解することは困難であるので、スイス銀行紙幣データと日本車データで、普通の LSD の判別でも変数選択が自然に行え、これらの用語をこのデータを用いて説明する。また、なぜ SVM が変数選択ができないかを検討した。

表 1. Summary of six Microarray Data [11].

Data	Description	Size	SM: Gene	Min, Mean, Max	JMP12
Alone et al. [1]	Normal (22) vs. tumour cancer (40)	62 *2000	64[44]: 1152	11,18,39	20:2/ 3:37
Chiaretti et al. [2]	Bcell (95) vs. Tcell (33)	128*12625	270[47]: 5385	9,19,62	94:1/ 2:31
Golub et al. [8]	All (47) vs. AML (25)	72*7129	69[43]: 1238	10,18,31	20:5:3/ 44
Shipp et al. [54]	Follicular lymphoma (19) vs. DLBCL (58)	77 *7130	213[42]: 3032	7,14,43	17:2/1: 57
Singh et al. [55]	Normal (50) vs. tumour prostate (50)	102 *12626	179[45]: 3990	13,22,47	46:4/6: 46
Tian et al. [59]	False (36) vs. True (137)	173 *12625	159[46]: 7221	28,45,4, 104	16:20/ 9:128

表 2 は Golub らの 69 個の SM の完全なリストである。列 SM1 は SM の連続番号で 69 個の SM があり、69 個の SM で構成されていることが分かる。「n」は、各 SM に

含まれる遺伝子数である。ほとんどの研究者が統計的方法または LASSO という新しい手法で高次元の遺伝子空間の分析に苦勞しているが、68 番と 69 番の SM は高々 31 個の遺伝子しかないので、各 SM を分析することは非常に簡単である。

表 2. Small Matroska of Golub et al. Data.

SM1	SM2	Gene	n	MNM	35	11	6630	17	0
1	11	7129	11	0	36	11	6613	19	0
2	11	7118	16	0	37	11	6594	12	0
3	11	7102	11	0	38	11	6582	16	0
4	11	7091	10	0	39	11	6566	16	0
5	11	7081	13	0	40	11	6550	16	0
6	11	7068	12	0	41	11	6534	19	0
7	11	7056	13	0	42	11	6515	14	0
8	11	7043	12	0	43	11	6501	19	0
9	11	7031	14	0	44	11	6482	14	0
10	11	7017	16	0	45	11	6468	21	0
11	11	7001	10	0	46	11	6447	21	0
12	11	6991	12	0	47	11	6426	20	0
13	11	6979	13	0	48	11	6406	23	0
14	11	6966	16	0	49	11	6383	19	0
15	11	6950	14	0	50	11	6364	19	0
16	11	6936	13	0	51	11	6345	24	0
17	11	6923	19	0	52	11	6321	19	0
18	11	6904	15	0	53	11	6302	20	0
19	11	6889	13	0	54	11	6282	22	0
20	11	6876	14	0	55	11	6260	19	0
21	11	6862	16	0	56	11	6241	24	0
22	11	6846	17	0	57	11	6217	21	0
23	11	6829	17	0	58	11	6196	25	0
24	11	6812	14	0	59	11	6171	27	0
25	11	6798	16	0	60	11	6144	20	0
26	11	6782	15	0	61	11	6124	23	0

27	11	6767	12	0	62	11	6101	28	0
28	11	6755	21	0	63	11	6073	23	0
29	11	6734	15	0	64	11	6050	23	0
30	11	6719	14	0	65	11	6027	28	0
31	11	6705	22	0	66	11	5999	23	0
32	11	6683	19	0	67	11	5976	23	0
33	11	6664	16	0	68	11	5953	31	0
34	11	6648	18	0	69	11	5922	31	0

4. まとめ

1997 年から 2010 年に、筆者は判別分析の新しい理論を確立した。改定 IP-OLDF は問題 1 と問題 2 を解決した。IP-OLDF は判別分析の新たな事実を示した。問題 4 を解決するために新手法 1 を提案した。小標本の研究データを分析したい研究者には新手法 1 は非常に簡単で強力ある。他の判別関数と改定 IP-OLDF を比較し優位性を示すことができた。この利点に加えて、検証標本の平均誤分類確率 M2 で最適なモデル選択が行える。さらに Fisher は判別係数および誤分類確率のための SE の式を定式化していないが判別係数の 95% CI が求まる。2010 年から応用研究として、試験の合否判定、スイス銀行紙幣データと日本車データを用いて LSD の判別に焦点を当てた。しかし 2015 年に成果を得て終了したがインパクトが弱かった。2015 年 10 月の終わりに 6 個の Microarray データで改定 IP-OLDF が自然に特徴選択を行うことができることが分かった。そこで、「Microarray データのための Matroska 特徴選択法」の新手法 2 を開発した。この手法は、データが線形分離可能な幾つかの SM と、線形分離可能でない高次元の遺伝子空間で構成されていることを明らかにした。多くの研究者は高次元遺伝子空間の解析に四苦八苦してきたが(問題 5)、新手法 2 で通常の統計的手法を用いて簡単に分析できるので問題 5 は簡単に解決できる。

新手法 2 の応用は、もし特定の遺伝子を修復する技術が確立されれば、BGS を直接修正すれば良いであろう。今回 LSD の判別であったので、MNM=0 の SM に注目した。しかし LINGO プログラムは、この後、MNM=1 以上になる SM を探すことができる。すなわち、MNM の小さな SM ほど癌に影響していると考えた。

現時点での応用は、手術を除く制癌剤や放射線療法で治癒した患者とそうでない患者のがん遺伝子のリストを比較することで、治療法の効果判定にすぐ利用できると考えている。

お願い

本研究論文を読まれた方は、共同研究者を紹介していただくか、この分野の研究者に連絡いただければありがたい。参考文献で著者名に下線を付けた論文は、全てRGにPDFをUPしてある。

REFERENCES

1. Alon, A. et al. (1999). Patterns of Gene Expression Revealed by Clustering Analysis of Tumor and Normal Colon Tissues Probed by Oligonucleotide Arrays, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 96, 6745-6750.
2. Chiaretti, S. et al. (2004). Gene expression profile of adult T-cell acute lymphocytic leukemia identifies distinct subsets of patients with different response to therapy and survival. *Blood*, April 1, 2004, 103/7, pp. 2771-2778.
3. Edger, A. (1935). The irises of the Gaspe Peninsula. *Bulletin of the American Iris Society*, 59, 2-5.
4. Fisher, R. A. (1936). The Use of Multiple Measurements in Taxonomic problems. *Annals of Eugenics*, 7, 179-188.
5. Fisher, R. A. (1956). *Statistical methods and statistical inference*. Hafner Publishing Co.
6. Flury, B., Riedel, H. (1988). *Multivariate Statistics: A Practical Approach*. Cambridge University Press.
7. Friedman, J. H. (1989). Regularized Discriminant Analysis. *Journal of the American Statistical Association*, 84/405, 165-175.
8. Golub, T.R. et al. (1999). Molecular Classification of Cancer: Class Discovery and Class Prediction by Gene Expression Monitoring. *Science*, 1999 Oct 15; 286(5439): pp. 531-537.
9. Goodnight, J. H. (1978). SAS Technical Report – The Sweep Operator: Its Importance in Statistical Computing – (R-100). SAS Institute Inc.
10. Glover, F. (1990). Improved linear programming models for discriminant analysis. *Decision Sciences*, 21, 771-785.
11. Jeffery, IB, Higgins, DG, Culhane, AC. (2006). Comparison and evaluation of methods for generating differentially expressed gene lists from microarray data, *BMC Bioinformatics*. Jul 26; pp. 7:359. <http://www.bioinf.ucd.ie/people/ian/>(Oct. 28, 2015)
12. Lachenbruch, P. A., Mickey, M. R. (1968). Estimation of error rates in discriminant analysis. *Technometrics* 10, 1-11.
13. Miyake, A., Shinmura, S. (1976). Error rate of linear discriminant function, F.T. de Dombal & F. Gremy editors 435 - 445, North-Holland Publishing Company.
14. Miyake, A., Shinmura, S. (1979). An algorithm for the optimal linear discriminant functions. *Proceedings of the International Conference on Cybernetics and Society*, 1447-1450.
15. Rubin, P. A. (1997). Solving mixed integer classification problems by decomposition. *Annals of Operations Research*, 74, 51-64.
16. Sall, J. P., Creighton, L., Lehman, A. (2004). *JMP Start Statistics, Third Edition*. SAS Institute Inc. (Shinmura, S. edited Japanese version)
17. Schrage, L. (2006). *Optimization Modeling with LINGO*. LINDO Systems Inc. (Shinmura, S. translated Japanese version)
18. Shinmura, S., Miyake, A. (1979). Optimal linear discriminant functions and their application. *COMPSAC*, 79, 167-172.
19. Shinmura, S. (2000a). A new algorithm of the linear discriminant function using integer programming. *New Trends in Probability and Statistics*, 5, 133-142.
20. Shinmura, S. (2000b). *Optimal Linear Discriminant Function using Mathematical Programming*. Dissertation, March 200, 1-101, Okayama Univ.
21. Shinmura, S. (2003). Enhanced Algorithm of IP-OLDF. *ISI2003 CD-ROM*, 428-429.
22. Shinmura, S. (2004). New Algorithm of Discriminant Analysis using Integer Programming. *IPSI 2004 Pescara VIP Conference CD-ROM*, 1-18.
23. Shinmura, S. (2005). New Age of Discriminant Analysis by IP-OLDF – Beyond Fisher’s Linear Discriminant Functions. *ISI2005*, 1-2.
24. Shinmura, S. (2007b). Comparison of Revised IP-OLDF and SVM. *ISI2009*, 1-4.
25. Shinmura, S. (2009). Practical discriminant analysis by IP-OLDF and IPLP-OLDF. *IPSI 2009 Belgrade VIPSI Conference CD-ROM*, 1-17.
26. Shinmura, S. (2011b). Beyond Fisher’s Linear Discriminant Analysis - New World of Discriminant Analysis -. *ISI2011 CD-ROM*, 1-6.
27. Shinmura, S. (2013). Evaluation of Optimal Linear Discriminant Function by 100-fold Cross Validation. *ISI2013 CD-ROM*, 1-6.
28. Shinmura, S. (2014a). End of Discriminant Functions based on Variance-Covariance Matrices. *ICORES*, 5-14.
29. Shinmura, S. (2014b). Improvement of CPU time of Linear Discriminant Function. *Statistics, Optimization and Information Computing*, vol. 2, 114-129.
30. Shinmura, S. (2014c). Comparison of Linear Discriminant Functions by K-fold Cross Validation. *Data Analytics 2014*, 1-6.
31. Shinmura, S. (2015a). The 95% confidence intervals of error rates and discriminant coefficients. *Statistics, Optimization and Information Computing*, vol. 3, 66-78.
32. Shinmura, S. (2015b). Four Serious problems and New Facts of the Discriminant Analysis. E. Pinson et al. (Eds.) *ICORES 2014 Revised and Selected Papers*, CCIS 509, 15-30, Springer.
33. Shinmura, S. (2015c). A Trivial Linear Discriminant Function. *Statistics, Optimization, and Information Computing*, Vol.3, December 2015, 322-335. DOI: 10.19139/soic.20151202.
34. Shinmura, S. (2015d). The Discrimination of the microarray data (Ver. 1). *Research Gate* (1), Oct. 28, 2015, 1-4.
35. Shinmura, S. (2015e). Feature Selection of three Microarray data. *Research Gate* (2), Nov.1, 2015, 1-7.
36. Shinmura, S. (2015f). Feature Selection of Microarray Data (3) – Shipp et al. *Microarray Data*. *Research Gate* (3), 2015, 1-11.
37. Shinmura, S. (2015g). Validation of Feature Selection (4) – Alon et al. *Microarray Data*. *Research Gate* (4), 2015, 1-11.

38. [Shinmura, S. \(2015h\)](#). Repeated Feature Selection Method for Microarray Data (5). Research Gate (5), Nov. 9, 2015, 1-12.
39. [Shinmura, S. \(2015i\)](#). Comparison Fisher's LDF by JMP and Revised IP-OLDF by LINGO for Microarray Data (6). Research Gate (6), Nov. 11, 2015, 1-10.
40. [Shinmura, S. \(2015j\)](#). Matroska Trap of Feature Selection Method (7) –Golub et al. Microarray Data. Research Gate (7), Nov. 18, 2015, 1-14.
41. [Shinmura, S. \(2015k\)](#). Minimum Sets of Genes of Golub et al. Microarray Data (8). Research Gate (8), Nov. 22, 2015, 1-12.
42. [Shinmura, S. \(2015l\)](#). Complete Lists of Small Matroska in Shipp et al. Microarray Data (9). Research Gate (9), Dec. 4, 2015, 1-81.
43. [Shinmura, S. \(2015m\)](#). Sixty-nine Small Matroska in Golub et al. Microarray Data (10). Research Gate, Dec. 4, 1-58.
44. [Shinmura, S. \(2015n\)](#). Simple Structure of Alon et al. et al. Microarray Data (11). Research Gate (11), Dec. 4, 2015, 1-34.
45. [Shinmura, S. \(2015o\)](#). Feature Selection of Singh et al. Microarray Data (12). Research Gate (12), Dec. 6, 2015, 1-89.
46. [Shinmura, S. \(2015p\)](#). Final List of Small Matroska in Tian et al. Microarray Data. Research Gate (13), Dec. 7, 1-160.
47. [Shinmura, S. \(2015q\)](#). Final List of Small Matroska in Chiaretti et al. Microarray Data. Research Gate (14), Dec. 20, 2015, 1-16.
48. [Shinmura, S. \(2015r\)](#). "Matroska Feature Selection Methods for Microarray Data," Research Gate Free paper (15), 1-16.
49. [Shinmura, S. \(2016a\)](#). Matroska Feature Selection Method for Microarray Data. Biotechno 2016, 1-6.
50. [Shinmura, S. \(2016b\)](#). New Method of Discriminant Analysis after R. Fisher – Advanced Research by Feature Selection Method for Microarray Data -. Springer. (2016 未刊行予定)
51. [Shinmura, S. \(2016c\)](#). The Best Model of the Swiss Banknote Data-Validation by the 95% CI of error rates and discriminant coefficients -. Optimization, and Information Computing, Vol.3, 322-335, 2015. DOI: 10.19139/soic.20151202.
52. [Shinmura, S. \(2016d\)](#). The K-fold Cross Validation for Small Sample Method. Data Analytic 2016, 1-6.
53. [Shinmura, S. \(2016e\)](#). The Discriminant Analysis of the Iris Data by New Theory. Data Analytic 2016, 1-6.
54. Shipp, M.A. et al. (2002). Diffuse large B-cell lymphoma outcome prediction by gene-expression profiling and supervised machine learning. Nature Medicine 8, 68-74.
55. Singh, D. et al. (2002). Gene expression correlates of clinical prostate cancer behavior. Cancer Cell: March 2002, Vol.1, 203-209.
56. Simon, N. Friedman, J. Hastie, T. and Tibshirani, R. (2013). A sparse-group lasso. J. Comput. Graph. Statist., 22:231-245, 2013.
57. Stam, A. (1997). Nontraditional approaches to statistical classification: Some perspectives on lp-norm methods. Annals of Operations Research, 74, 1-36.
58. Taguchi, G., Jugulum, R. (2002). The Mahalanobis-Taguchi Strategy – A Pattern Technology System. John Wiley & Sons.
59. Tian, E. et al. (2003). The Role of the Wnt-Signaling Antagonist DKK1 in the Development of Osteolytic Lesions in Multiple Myeloma. The new England Journal of Medicine, Vol. 349, 26, 2483-2494.
60. Vapnik, V. (1995). The Nature of Statistical Learning Theory. Springer-Verlag.
61. 小西貞則, 本田正幸 (1992). 判別分析における誤判別率推定とブートストラップ法. 応用統計学, 21/2, 67-100.
62. 清水忠彦, 常俊義三, 河野洋, 新村秀一 (1975). 光化学スモッグによる自覚症状の分類(共著). 大気汚染研究, 9(4) 734-741.
63. 新村秀一, 北川護, 高木義人, 野村裕, (1973). 2段階重みづけによるスペクトル診断, 第12回日本ME学会大会論文集, 107-108.
64. 新村秀一, 北川護, 野村裕, (1974). スペクトル診断(第2報), 第13回日本ME学会大会論文集, 414-415.
65. 新村秀一 (1984). 医療データ解析, モデル主義そしてOR. オペレーションズ・リサーチ, 29/7, 415-421.
66. 新村秀一訳著(1986). SASによる回帰分析の実践. 朝倉書店.
67. 新村秀一(1996). 重回帰分析と判別分析のモデル決定(2): 19変数をもつC.P.D.データのモデル決定. 成蹊大学経済学部論集, 27/1, 180-203.
68. 新村秀一 (1998). 数理計画法を用いた最適線形判別関数. 計算機統計学, 11/2, 89-101.
69. 新村秀一, 垂水共之 (2000). 乱数データを用いた最適線形判別関数の評価. 計算機統計学, 12/2, 107-123.
70. 新村秀一 (2007a). 改定IP-OLDFによるIP-OLDFの問題点の解消. 計算機統計学, 19 / 1, 1-16.
71. 新村秀一 (2007b). 数理計画法による判別分析の10年. 計算機統計学, 20 / 1&2, 59-94.
72. 新村秀一 (2010a). 最適線形判別関数. 日科技連出版.
73. 新村秀一 (2010b). 線形計画法による改定IP-OLDFの計算時間の改善. 計算機統計学, 22/1, 37-57.
74. 新村秀一 (2011a). 合否判定データによる判別分析の問題点. 応用統計学, 40/3, 157-172.
75. 新村秀一 (2011b). 数理計画法による問題解決法. 日科技連出版.
76. 新村秀一 (2012). コラム「SAS/JMPとの歩み」, SAS Technical News, 春, 夏, 秋, 冬号.
77. 新村秀一 (2015). いかにかに研究成果を世界に発信するか - 判別分析の4つの問題と新事実 -. SAS ユーザー会, 484-493.
78. 三宅章彦, 新村秀一 (1980). 最適線形判別関数のアルゴリズムとその応用, 医用電子と生体工学, 18/6, 452-454.

Tackling Control Problems in General with Unified Neural Models

Danilo Vasconcellos Vargas and Junichi Murata (Kyushu University)

Abstract— Many features of neural networks such as synaptic plasticity, feedback, time scales (slow and fast neurons) and inhibition/excitation of neurons was recently joined into a unified neural model. To learn the topology and parameters values of the model, a neuro-evolutionary method is used. This article explains the importance of using the mentioned neural network features in this unified neuron model to solve five different control problems. In fact, these problems are learned without changing any parameters of the algorithm. This demonstrates that the architecture has great learning capabilities.

Key Words: Neural Networks, Neuroevolution, Evolutionary Computation.

1 Introduction

Often, learning algorithms are the only solution available to problems that are too complex to be solved with hand-coded programs. They are, for example, used to recognize speech in cell phones, process and extract knowledge from problems with big data, play games comparatively to humans and so on. Moreover, they are a natural solution to dynamic problems since they can learn, i.e. adapt to changes.

The impact of learning algorithms nowadays is enormous, yet the area has the potential to expand even further. For that, however, it is necessary that learning algorithms be able to work on new problems without the presence of an expert. Current algorithms behave sometimes erratically on new problems or require a lot of trial and error and prior knowledge to work.

To build an algorithm that can tackle different problems it is necessary to have a general representation. The most general representation is perhaps a graph with nodes composed of various types of functions. Provided that brains are also graphs of neurons, this justifies the bio-inspiration in neural networks. The only way to optimize not only connection weights but also topology of neural networks is with neuroevolution, because evolution can optimize any kind of problem including ones where the model itself grows or decreases in size. Consequently, evolution is chosen as the learning algorithm and neuroevolution is the underlining basis for this work.

In a recent article²⁷⁾, a neuroevolution based learning algorithm capable of learning various classes of problems without any prior-knowledge was proposed. Moreover, this new neuroevolution based learning algorithm unified most of the neuron representations into one. Since every kind of neuron is specifically good for a certain type of task, the natural selection of the neuron type for each problem suits well the objective of solving a wide range of problems without any prior knowledge. Furthermore, a new niching mechanism and diversity paradigm are created to aid the evolution of this complex representation. The previously proposed method is called Spectrum-diverse Unified Neuroevolution Architecture (SUNA). In summary, SUNA has the following features:

- Unified Neuron Representation - A new neuron representation is proposed that unifies most of the proposed neuron variations into one, giving the method a greater power of representation.
- Novelty-Based Diversity Preserving Mechanism - Solutions are not only different; the frequency,

types of neurons and connections used may suggest a completely different approach to solve the problem. For example, the use of many neuro-modulated connections against normal connections in a network is a different approach. Such diversity in the approaches used should be preserved and therefore a new novelty-based diversity is proposed which keeps track of previous solutions and preserves the different approaches spotted.

- Meaningful Diversity for Large Chromosomes - Instead of comparing chromosomes, this diversity measure compares values of a set of phenotype-based or genotype-based metrics. In other words, spectra¹ of features are compared. By comparing spectra, the diversity is still meaningful for large chromosomes² as well as it is problem independent.
- State-of-the-Art Results - In all five classes of problems tested, the proposed algorithm had either better or similar results when compared with NeuroEvolution of Augmenting Topologies (NEAT).
- Few Parameters - SUNA has only eight parameters while NEAT has 33.

2 Related Work

In the following, there is a brief review of the LCS's and Neuroevolution's literature. Here, we will restrain the brief review to only continuous action LCS algorithms and some of the most salient Neuroevolution methods. For a complete review of both LCS's and Neuroevolution's literature please refer to ^{25, 17)} and ⁹⁾, respectively.

LCSs with continuous actions were first applied to function approximation with the XCSF algorithm ^{36, 6, 23)}, later with variants using fuzzy logic ^{26, 5, 8)}, neural-based LCS algorithms ^{4, 5)} and genetic programming-based algorithms ¹³⁾. Regarding reinforcement learning problems, LCSs with discrete actions were used to solve complex mazes ¹⁶⁾, cart-pole balancing ^{24, 2)} and the two-actions mountain car

¹The word spectrum here is used to denote a set of values of histograms or metrics, defining the overall characteristics of the chromosome in a compressed manner.

²High dimensional spaces are exponentially more sparse than low dimensional ones. That is the reason why distance metrics for long chromosomes are less meaningful. To avoid this complication, here the dimensions are converted to a small number of features which compose the spectrum of the chromosome

18) problems. Continuous action LCSs were applied to control robotic arms^{19, 7)}, navigation problems^{3, 12)}, complex mazes^{31, 30)} and dynamical mazes²⁹⁾. Novelty-Organizing Team of Classifiers (NOTC), specifically, was applied to pole balancing and a discrete action of mountain car in³³⁾. NOTC related algorithm without the concepts of team and dual fitness, Novelty-Organizing Classifiers (NOC), was applied to continuous mazes and classification problems³²⁾.

Neuroevolution, where both the structure and parameters are evolved, is a relatively new research area. Therefore, there are fewer algorithms, to cite some: GNARL¹⁾, NEAT²¹⁾, EANT¹⁴⁾ and EPNet³⁷⁾.

3 The Genome

The genome used is a direct encoding scheme made by a list of connections and a list of neurons. The evolvable parameters and their respective range values are described in Table 1, in which N is the set of neurons present in the respective chromosome.

4 Evolving the Unified Neural Model

In order to evolve structures, special evolutionary methods are needed. A new evolutionary method was proposed²⁷⁾ that is based on a new diversity paradigm. Here, we show how diversity of structures can be achieved without creating a dependence on the problem.

The evolution steps are described in detail in the following subsections.

4.1 Initialization

First, all chromosomes in the population are initialized to a set of input and output neurons where the number of input/output neurons equal the input/output of the problem. To create an initial diversity, I_m initial mutations (see Section 4.6) without weight perturbations are applied to all chromosomes.

4.2 Evaluation

In the evaluation stage every chromosome present in the population is activated for a whole trial. Every control problem is transformed into a reinforcement learning problem by simply adding some type of feedback (reward) to the control system. This feedback or reward is a measure telling roughly how good the controlling behavior was in the previous iteration. At the end of each trial, the average reward received throughout is used as fitness. This process is repeated until the entire population has been activated. Afterwards, the spectrum of every chromosome is calculated.

4.3 Spectrum Diversity

Diversity and protection of innovation is a challenging problem for Topology and Weight Evolving Artificial Neural Networks (TWEANN), basically because finding a metric to compare the structures of TWEANNs is difficult. Speciation tries to approximate this comparison by using innovation numbers (a certain type of identification number) on the genes and therefore the alignment of such genes gives a fast approximation of structure similarities²¹⁾. However, two structures originated from different evolutionary paths are always seen as totally different and unmatching structures because they differ in innovation numbers. This happens even if they are the same or similar in structure. And since genes are compared one per one it does not scale well with the size of chromosome.

In Physics and Chemistry, a similar problem takes place. Atoms combine with each other into complex

structures, but it is discovering these structures which is a hurdle. To solve these problems various types of spectra are used (e.g., nuclear magnetic resonance spectrum).

Similarly, here we propose to use spectra to identify and compare structures. The spectrum is itself designed for the representation, composed of a set of genotype's and phenotype's properties. Computationally speaking, the spectrum is an array with each property being an element of this array. Here the spectrum is composed of the following properties:

- The number of identity neurons;
- The number of sigmoid neurons;
- The number of threshold neurons;
- The number of random neurons;
- The number of control neurons;
- The number of slower neurons (adaptation speed greater than one).

This combination of properties divides the set of solutions by how they approach to solve the problem.

Once the spectrum of all chromosomes are calculated their spectrum are fed into the Novelty Map³⁴⁾ (Section 4.4) where only the spectra that are mapped into the same cell creates a group (species) and compete. The entire process of calculating the spectra and insertion in the Novelty Map is called Spectrum Diversity, because the spectrum of chromosomes is used to separate the population into groups(species), i.e., diversity is kept by creating species based on the similarity of their spectrum.

Spectrum diversity uses a measure of diversity based on the distance between the spectra of two structures. The advantages of using this type of diversity are:

- Problem Independence - The metric is not defined based on problem characteristics, therefore it works independent of problem type and size;
- Scalability - Since the spectrum should describe properties of the structure as a whole, the size of the chromosome does not interfere with the metric.

4.4 Novelty Map

Novelty Map is a table with the most novel inputs according to a given novelty metric. When an input is presented to the map, competition takes place where the cell with the closest weight array wins. This winner cell is activated and can be used in many ways. Here, the winner cell is used to identify to which species (group) the input pertains. Afterwards, the table is updated by substituting the weight array of the least novel cell (according to the novelty measure) with the input array if and only if the input array has higher novelty.

This table shares some similarities with self-organizing map¹⁵⁾ and neural gas¹⁰⁾, but its behavior is independent of input frequency and it uses fewer cells to map the same input space (cell's efficiency).

The novelty metric used in this article is the uniqueness. Let S be a set of arrays. Uniqueness is defined for an array a_i in relation to the other arrays in S by:

$$U = S \setminus \{a_i\} \quad (1)$$

$$uniqueness = \min_{a_k \in U} (dist(a_i, a_k)). \quad (2)$$

Table 1: Evolvable Parameter Space. N is the set of neurons in a given chromosome.

Related to	Parameter	Range
Neuron	<i>adaptationSpeed</i>	{1, 7, 49}
	Type	{ <i>control, random, sigmoid, threshold, identity</i> }
Weight	From Neuron	N
	To Neuron	N
	Weight	unbounded
	Neuromodulation	$\{-1\} \cup N$

4.4.1 Novelty Map Population

Novelty Map Population is a Novelty Map where cells are subpopulations and inputs are some value related to the individual. Here, the spectrum of chromosomes is used as input. The Novelty Map Population is used to create niches where only chromosomes with similar spectrum will compete with each other, avoiding deleterious competition.

4.5 Selection

In the selection stage, only one individual survives inside every cell (species) of the Novelty Map. To decide which individual is going to survive, the individuals are compared based on their fitness. In case of a draw, the individual that uses less neurons wins (i.e. the least complex wins).

In fact, subpopulations are the same as niches, because chromosomes that fall inside the same subpopulation have a similar histogram and therefore are similar themselves. Notice that there is no competition between niches. There is also no preference or advantage to niches that have better average fitness such as with fitness sharing procedures. Different approaches will be part of different niches (subpopulations) and survive even if they have poor fitness. As shown in ²⁸⁾, only by avoiding any kind of competition (direct or indirect) between niches (subpopulations) it is possible to avoid deleterious competition. Giving advantages to niches that are already strong will decrease further the chances of different approaches to surge. Moreover, niches that are already good will progress independent of having advantages over other niches.

After selection, individuals that survived become parents and the algorithm enters in reproduction stage. As a matter of fact, to keep the number of parents constant, if a subpopulation is empty, a random valid parent from a different subpopulation is chosen and copied instead.

4.6 Reproduction

With the parents defined, the remaining vacancies in the population are filled by the following sequence of procedures:

1. A parent is chosen at random;
2. S_m step mutations are applied to the parent to create a child;
3. All connections have a 50% chance of being perturbed with a random value in the range $[-w, w]$, where w is the current weight of the respective connection.

A mutation can be any of the following procedures:

- Add a neuron. Everything is randomly chosen, but first the neuron has an additional probability of being a control neuron. Furthermore, two new connections are created connecting this neuron to the network (one random connection from this neuron and another random one to this neuron);

- Delete a neuron (all connection to the respective neuron are also deleted). Input/output neurons cannot be deleted;
- Add a connection. The connection has a probability of being neuromodulated (neuromodulation probability) and initial weights are either 1 or -1 . Everything else is randomly decided;
- Delete a connection.

Any of the above mutation procedures have a chance of occurring defined by the mutation probability array. The mutation probability array (M_{pa}) is composed of four real numbers relative to the probability of respectively adding a neuron, delete a neuron, add a connection and delete a connection. So for example $\{0.1, 0.1, 0.4, 0.4\}$ would mean 10% chance of adding a neuron, 10% chance of deleting a neuron, 40% chance of adding a connection and 40% chance of deleting a connection.

5 Experiments

In this section both SUNA and NEAT will be tested on five different classes of problems, each one requiring different learning features to solve. The set of parameters are kept the same for all the problems for both algorithms (see Section 5.1).

5.1 Experiments' Settings

The NEAT code used is the 1.2.1 version of NEAT C++ software package ²⁰⁾. Table 2 shows the NEAT parameters. Actually, the used parameters are the same as the one provided with the package for solving double pole balancing task. A couple of variations of it were tested, but the original one performed better. Moreover, some modifications were necessary to make NEAT work on problems with negative fitness, since it does not work out of the box. Therefore, a value big enough (2000) was always added to the final accumulated fitness, transforming the negative fitness into a positive one. Additionally, to satisfy NEAT's requirements, for all problems the input range was converted to $(-1, 1)$ while the output range was transformed into $(0, 1)$. This conversion naturally informs the algorithm about the maximum/minimum of both input and output, simplifying the problems at hand. Such changes are not necessary for the proposed method.

Regarding the proposed method, a couple of settings were tested to arrive in the parameters described in Table 3. All results are averaged over 30 runs³ and only the best result among 100 trials⁴ is plotted. Every run, when not specified otherwise, has a maximum of 2×10^5 trials.

³Run is defined as a sequence of trials until the maximum number of trials is reached.

⁴Trial is a set of iterations between agent and environment until a problem defined stopping criteria is met.

Table 2: Parameters for NEAT

Parameter	Value	Parameter	Value
trait_param_mut_prob	0.5	trait_mutation_power	1.0
linktrait_mut_sig	1.0	nodetrans_mut_sig	0.5
weigh_mut_power	2.5	recur_prob	0.00
disjoint_coeff	1.0	excess_coeff	1.0
mutdiff_coeff	0.4	compat_thresh	3.0
age_significance	1.0	survival_thresh	0.20
mutate_only_prob	0.25	mutate_random_trait_prob	0.1
mutate_link_trait_prob	0.1	mutate_node_trait_prob	0.1
mutate_link_weights_prob	0.9	mutate_toggle_enable_prob	0.00
mutate_gene_reenable_prob	0.000	mutate_add_node_prob	0.03
mutate_add_link_prob	0.05	interspecies_mate_rate	0.001
mate_multipoint_prob	0.6	mate_multipoint_avg_prob	0.4
mate_singlepoint_prob	0.0	mate_only_prob	0.2
recur_only_prob	0.0	pop_size	100
dropoff_age	15	newlink_tries	20
print_every	5	babies_stolen	0
num_runs	1		

Table 3: Parameters for SUNA

Parameter	Value
Number of initial mutations (I_m)	200
Number of step mutations (S_m)	5
Population size ($ P $)	100
Maximum Novelty Map population (Max_n)	20
Mutation probability array (M_{pa})	{0.01, 0.01, 0.49, 0.49}
Neuromodulation probability	0.1
Control neuron probability	0.2
Excitation threshold	0.0

5.2 Results

The mountain car problem ²²⁾ is defined by the following equations:

$$\begin{aligned}
 pos &\in (-1.2, 0.6) \\
 v &\in (-0.07, 0.07) \\
 a &\in (-1, 1) \\
 v_{t+1} &= v_t + (a_t) * 0.001 + \cos(3 * pos_t) * (-0.0025) \\
 pos_{t+1} &= pos_t + v_{t+1},
 \end{aligned} \tag{3}$$

where pos is the position of the car, a is the car's action and v is the velocity of the car. The starting velocity and position are respectively 0.0 and -0.5 . If $v < 0$ and $pos \leq -1.2$, the velocity is set to zero. When the car reaches $pos \geq 0.6$ the trial is terminated and the algorithm receives 0 as reward. In all other positions the algorithm receives -1 as a reward. Moreover, if the algorithm's steps exceed 10^3 the trial is terminated and the common reward of -1 is returned to the algorithm.

NEAT can only deal with certain ranges of input/output, therefore the input was converted to the $(-1, 1)$ range while the output was converted to the $(0, 1)$ range. Naturally, this conversion informs the algorithm about the maximum/minimum of both input and output, an information that was not readily available in the original problem, therefore the problem is to some extent simplified.

Figure 1 shows a comparison between SUNA and NEAT in the mountain car problem. SUNA performs better than NEAT, converging as fast as NEAT even though SUNA sees a bigger search space. The reason behind the worse performance in NEAT seems to be related with unstable individuals taking over the population from time to time, making the results vary around the best solution but rarely staying in that position. Moreover, procedures that check for stagnation make things worse when NEAT has already reached a good result.

The non-simplified version of the problem, i.e., with raw input and output is shown in Figure 2. SUNA performs equally well on all problems, showing that the presence or absence of normalization in the input/output is not an issue. NEAT, on the contrary, struggles with raw input and when the raw output is present it performs very poorly. It is understandable, NEAT has only sigmoid input nodes that squeeze values into the $(-1, 1)$ range and outputs nodes in the $(0, 1)$ range and therefore can not cope with this type of problem. Having said that, it is still a limitation, compromising the automatization and limiting the application to some problems.

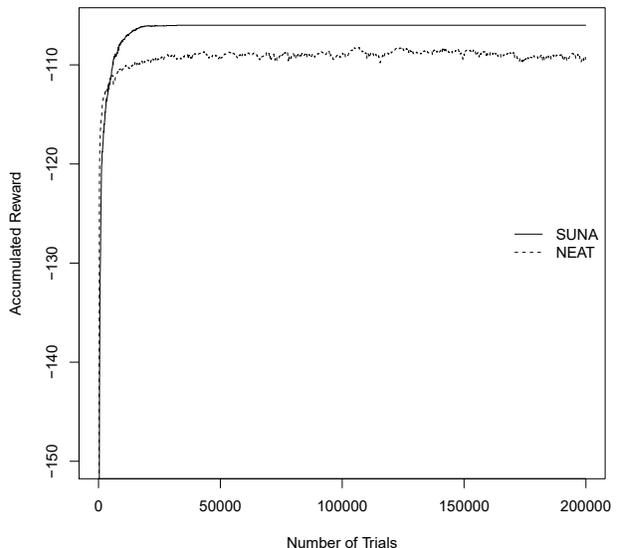


Fig. 1: Comparison of SUNA and NEAT in the mountain car problem.

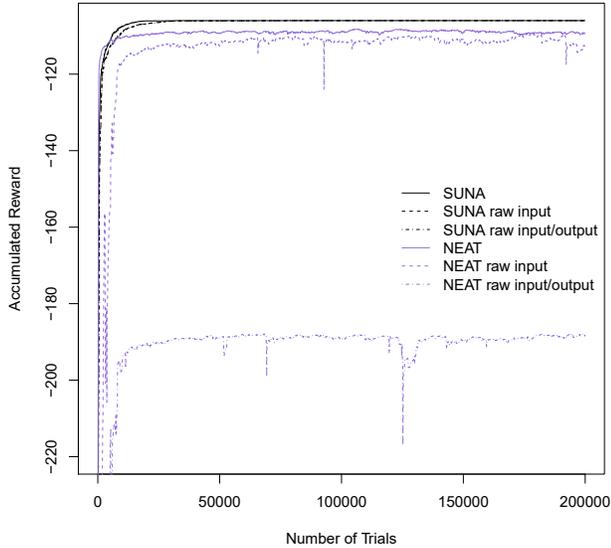


Fig. 2: In real world problems, the maximum/minimum of either input or output is often not available, therefore a normalization is not readily possible. Here tests show the performance of both SUNA and NEAT when both input and output are normalized (SUNA, NEAT), when the input is raw (SUNA raw input, NEAT raw input) or when both input and output are raw (SUNA raw input/output, NEAT raw input/output). The tests were made in the mountain car problem.

5.3 Double Pole Balancing

Double pole balancing is the famous problem of balancing a pole above a cart by only moving the cart forward or backward. This problem has six observable variables. The dynamics used here are the same mentioned by the following papers^{35), 11), 21)}. In fact, the code was adapted from²⁰⁾ which is the same code used in other papers^{11), 21)}. All the original parameters of the problem were also kept the same.

Figure 3 shows that SUNA and NEAT converges to the same final performance. In other words, both algorithms learned to balance the pole for 10^5 steps (the maximum allowed) in all the tests. SUNA converges slower than NEAT. This is expected due to the greater complexity of the SUNA's model.

5.4 Non-Markov Double Pole Balancing

Non-Markov double pole balancing has the same dynamics as the double pole balancing. However, the agent only observes three variables (position of the cart and angles of both poles) instead of six. To keep the poles balanced it is necessary to estimate the velocity of the cart and pole angles. Therefore, this problem presents an additional difficulty. The previous input needs to be somehow kept and used to compose an estimate of velocity.

Notice that in this article the double pole balancing fitness function is used, i.e., a modified fitness function that penalizes oscillations is not used²¹⁾. Thus, this formulation of the non-Markov double pole balancing problem is relatively more difficult.

Comparison results are shown in Figure 4. SUNA performs much better than NEAT in this problem. In fact, SUNA achieves 70% of the maximum possible average accumulated reward while NEAT reaches only

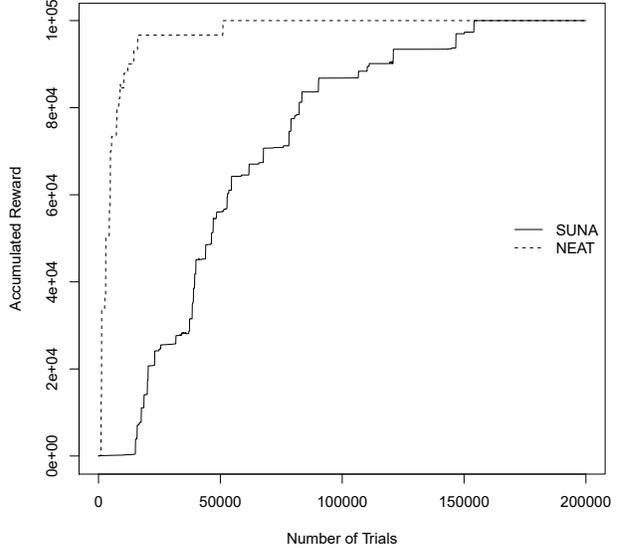


Fig. 3: Double Pole Balancing.

37%. But what features present in the proposed algorithm enable it to outperform NEAT? In short, there are basically three important features: slow neurons (responsible for computing approximation of derivatives, averages and so on), real weights (accurate computation of estimates) and random neurons (exploration).

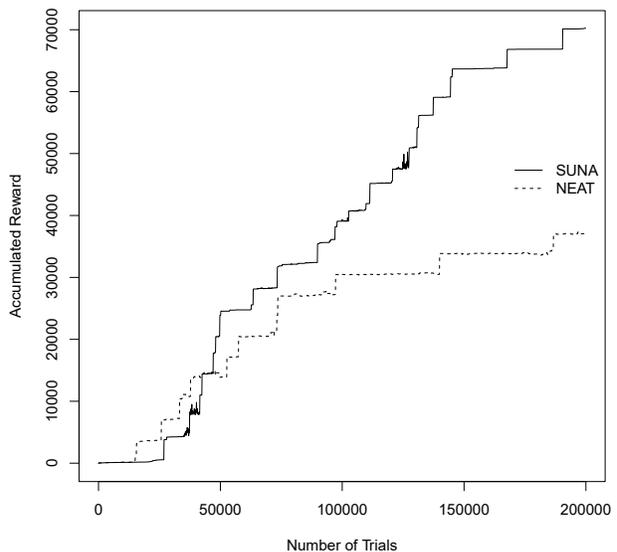


Fig. 4: Performance of both SUNA and NEAT in the non-Markov double pole balancing problem.

5.5 Multiplexer

Multiplexer is a binary problem with a single bit output and with the input composed of data and address variables. To compute the correct output, *abits* address variables are used to select one of the other 2^{abits} data variables. This selected data variable is the correct output. In this manner, the algorithm must first separate the address input from the data input and then use the address information to select

the data part of the input. This problem is coded as a reinforcement learning problem where each correct answer is rewarded with 0 and each incorrect answer is rewarded with -1 . Every possible set of inputs are presented during a trial in random order, not allowing learning algorithms to memorize the sequence of outputs instead of the multiplexer function.

Figure 5 shows that SUNA outperforms NEAT in the multiplexer problem with $abits = 3$ (i.e., three address variables and eight data variables). After 2.0×10^5 trials, an average of -620 ($\approx 70\%$ accuracy) accumulated reward is achieved by SUNA while NEAT reaches -720 ($\approx 65\%$ accuracy). However, SUNA continues improving its accuracy further and if more trials are allowed it would reach much higher accuracy. NEAT, on the other hand, reaches rapidly its peak of accuracy without further improvements.

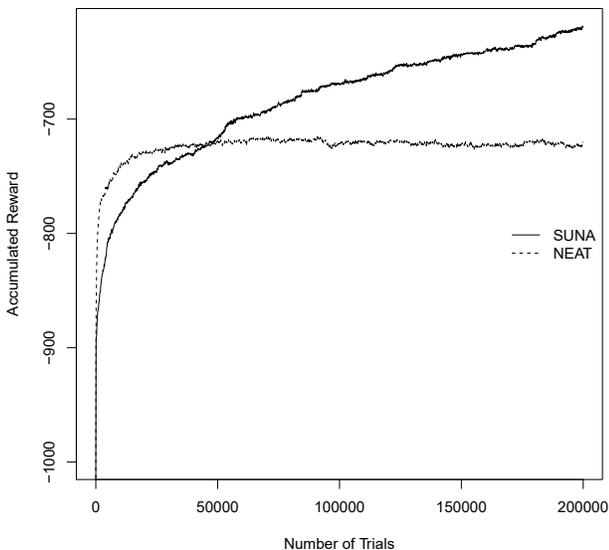


Fig. 5: SUNA outperforms NEAT in the multiplexer problem.

5.6 Function Approximation

In this problem the algorithm has to learn a sequence given by the following equation:

$$y = \frac{x^3}{1000} + 0.4x + 20 \sin\left(\frac{x}{10}\right) + 20 \sin(100x), \quad (4)$$

where x and y are respectively the input and output of the problem. Moreover, the value of x varies from -100 to 100 in unit time steps. The reward is the negative modulus of the difference between the agent's action (agent's estimation of y) and the correct sequence output y .

This problem cannot be solved properly by NEAT, since its input and output need to be real numbers of unknown range otherwise the problem is unreasonably easy. Therefore, here only SUNA's result is plotted (see Figure 6). SUNA gets a very close approximation to the curve.

6 Discussion: The Laws of Learning

It was shown that each problem class requires some features from the learning algorithm in order to be tackled. However, these features are not specific to each problem class. Many problem classes require similar learning features. Therefore, the question of

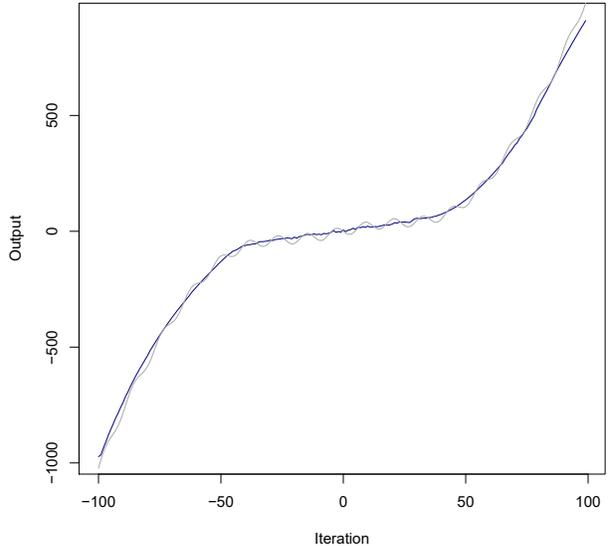


Fig. 6: Results for the function approximation problem learned by SUNA. Average of the final learned sequence (dark blue) and the reference sequence (light gray) are shown.

whether there is a minimal set of features required to solve all problems is raised.

Thus, similarly to the laws of Physics, which are the minimum set of dynamics that describe the universe. Are there a minimum set of learning features (neuron types, recurrency, etc...) that would allow a learning algorithm to learn any problem?

We think there is a minimum set. In this work we identified some important learning features. However, there are certainly many more that need to be identified and unified.

7 Acknowledgment

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

- 1) P. J. Angeline, G. M. Saunders, and J. B. Pollack. An evolutionary algorithm that constructs recurrent neural networks. *Neural Networks, IEEE Transactions on*, 5(1):54–65, 1994.
- 2) A. Bonarini. Evolutionary learning of fuzzy rules: competition and cooperation. In *Fuzzy Modelling*, pages 265–283. Springer, 1996.
- 3) A. Bonarini, C. Bonacina, and M. Matteucci. Fuzzy and crisp representations of real-valued input for learning classifier systems. *Learning Classifier Systems*, pages 107–124, 2000.
- 4) L. Bull. On using constructivism in neural classifier systems. *Parallel problem solving from nature-PPSN VII*, pages 558–567, 2002.
- 5) L. Bull and T. O'Hara. Accuracy-based neuro and neuro-fuzzy classifier systems. In *Proceedings of the Genetic and Evolutionary Computation Conference*, pages 905–911. Morgan Kaufmann Publishers Inc., 2002.
- 6) M. Butz, P. Lanzi, and S. Wilson. Function approximation with XCS: Hyperellipsoidal conditions, recursive least squares, and compaction. *Evolutionary Computation, IEEE Transactions on*, 12(3):355–376, 2008.

- 7) M. V. Butz and O. Herbot. Context-dependent predictions and cognitive arm control with xcsf. In *Proceedings of the 10th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 1357–1364. ACM, 2008.
- 8) J. Casillas, B. Carse, and L. Bull. Fuzzy-XCS: A michigan genetic fuzzy system. *Fuzzy Systems, IEEE Transactions on*, 15(4):536–550, 2007.
- 9) D. Floreano, P. Dürr, and C. Mattiussi. Neuroevolution: from architectures to learning. *Evolutionary Intelligence*, 1(1):47–62, 2008.
- 10) B. Fritzke. A growing neural gas network learns topologies. *Advances in neural information processing systems*, 7:625–632, 1995.
- 11) F. J. Gomez and R. Miikkulainen. Solving non-markovian control tasks with neuroevolution. In *IJCAI*, volume 99, pages 1356–1361, 1999.
- 12) G. Howard, L. Bull, and P. Lanzi. Towards continuous actions in continuous space and time using self-adaptive constructivism in neural XCSF. In *Proceedings of the 11th Annual conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 1219–1226. ACM, 2009.
- 13) M. Iqbal, W. N. Browne, and M. Zhang. Xcsr with computed continuous action. In *AI 2012: Advances in Artificial Intelligence*, pages 350–361. Springer, 2012.
- 14) Y. Kassahun and G. Sommer. Efficient reinforcement learning through evolutionary acquisition of neural topologies. In *In 13th European Symposium on Artificial Neural Networks (ESANN)*. Citeseer, 2005.
- 15) T. Kohonen. *Self-organizing maps*, volume 30. Springer, 2001.
- 16) P. Lanzi, D. Loiacono, S. Wilson, and D. Goldberg. XCS with computed prediction in multistep environments. In *Proceedings of the 2005 conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 1859–1866. ACM, 2005.
- 17) P. Lanzi and R. Riolo. A roadmap to the last decade of learning classifier system research (from 1989 to 1999). *Learning Classifier Systems*, pages 33–61, 2000.
- 18) P. L. Lanzi, D. Loiacono, S. W. Wilson, and D. E. Goldberg. Classifier prediction based on tile coding. In *Proceedings of the 8th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, pages 1497–1504. ACM, 2006.
- 19) P. Stalph and M. Butz. Learning local linear jacobians for flexible and adaptive robot arm control. *Genetic programming and evolvable machines*, 13(2):137–157, 2012.
- 20) K. Stanley, I. V. Karpov, E. Bahceci, and T. D’Silva. NEAT C++. <http://nn.cs.utexas.edu/keyword?neat-c>, 2001–2011.
- 21) K. Stanley and R. Miikkulainen. Evolving neural networks through augmenting topologies. *Evolutionary computation*, 10(2):99–127, 2002.
- 22) R. S. Sutton. Generalization in reinforcement learning: Successful examples using sparse coarse coding. In *Advances in Neural Information Processing Systems 8*, 1996.
- 23) H. Tran, C. Sanza, Y. Duthen, and T. Nguyen. XCSF with computed continuous action. In *Genetic And Evolutionary Computation Conference: Proceedings of the 9th annual conference on Genetic and evolutionary computation*, volume 7, pages 1861–1869, 2007.
- 24) K. Twardowski. Credit Assignment for Pole Balancing with Learning Classifier Systems. pages 238–245.
- 25) R. Urbanowicz and J. Moore. Learning classifier systems: a complete introduction, review, and roadmap. *Journal of Artificial Evolution and Applications*, 2009:1, 2009.
- 26) M. Valenzuela-Rendón. The fuzzy classifier system: A classifier system for continuously varying variables. In *Proceedings of the Fourth International Conference on Genetic Algorithms pp346-353, Morgan Kaufmann I*, volume 991, pages 223–230, 1991.
- 27) D. V. Vargas and J. Murata. Spectrum-diverse neuroevolution with unified neural models. *IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems*.
- 28) D. V. Vargas, J. Murata, H. Takano, and A. C. B. Delbem. General subpopulation framework and taming the conflict inside populations. *Evolutionary computation*, 23(1):1–36, 2015.
- 29) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Continuous adaptive reinforcement learning with the evolution of self organizing classifiers. In *Development and Learning and Epigenetic Robotics (ICDL), 2013 IEEE Third Joint International Conference on*, pages 1–2. IEEE, 2013.
- 30) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Self organizing classifiers and niched fitness. In *Proceedings of the fifteenth annual conference on Genetic and evolutionary computation conference*, pages 1109–1116. ACM, 2013.
- 31) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Self organizing classifiers: first steps in structured evolutionary machine learning. *Evolutionary Intelligence*, 6(2):57–72, 2013.
- 32) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Novelty-organizing classifiers applied to classification and reinforcement learning: towards flexible algorithms. In *Genetic and Evolutionary Computation Conference, GECCO ’14, Vancouver, BC, Canada, July 12-16, 2014, Companion Material Proceedings*, pages 81–82, 2014.
- 33) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Novelty-organizing team of classifiers—a team-individual multi-objective approach to reinforcement learning. In *SICE Annual Conference (SICE), 2014 Proceedings of the*, pages 1785–1792. IEEE, 2014.
- 34) D. V. Vargas, H. Takano, and J. Murata. Novelty-organizing team of classifiers in noisy and dynamic environments. In *Evolutionary Computation (CEC), 2015 IEEE Congress on*, pages 2937–2944. IEEE, 2015.
- 35) A. P. Wieland. Evolving neural network controllers for unstable systems. In *Neural Networks, 1991., IJCNN-91-Seattle International Joint Conference on*, volume 2, pages 667–673. IEEE, 1991.
- 36) S. W. Wilson. Classifiers that approximate functions. *Natural Computing*, 1(2-3):211–234, 2002.
- 37) X. Yao and Y. Liu. A new evolutionary system for evolving artificial neural networks. *Neural Networks, IEEE Transactions on*, 8(3):694–713, 1997.

忘却機能を持った Deep Belief Network による構造適応型学習

○鎌田 真 (広島市立大学大学院情報科学研究科情報科学専攻)
市村 匠 (県立広島大学経営情報学部経営情報学科)

An Adaptive Learning Method with Forgetting in Deep Belief Network

*S. Kamada (Dept. of Intelligent Systems, Graduate School of Information Sciences,
Hiroshima City University)

T. Ichimura (Faculty of Management and Information Systems,
Prefectural University of Hiroshima)

Abstract— Deep Belief Network (DBN) has a deep architecture that can represent multiple features of input patterns hierarchically with the pre-trained Restricted Boltzmann Machines (RBM). The adaptive learning method that can discover an optimal number of hidden neurons or layers according to the input space is an important method in terms of the stability of the model as well as the computational costs although a traditional RBM or DBN model cannot change its network structure during learning phase. Moreover, we should consider the regularities in the sparse of network to extract explicit knowledge from the network because the trained network is often a black box. In previous research, we have developed the combination method of adaptive and structural learning method of RBM with Forgetting. In this paper, we propose the adaptive learning method of DBN that can determine an optimal number of hidden layers during learning. We evaluated our proposed model on CIFAR-10 data set.

Key Words: DBN, RBM, Deep Learning, Adaptive Learning Method

1 はじめに

近年の情報技術の発展に伴い、収集できる情報量は爆発的に増加し、これらの情報を扱うための多種多様な分析手法が提案されている。例えば、スマートフォンを始めとするセンシングデバイスの普及により主観的かつマルチモーダルなデータ収集が容易になった¹⁾。また、インダストリー 4.0 における工場の計測データ²⁾や医療検査データ³⁾などのビックデータをクラウドサーバ上で自動収集し、膨大に蓄積されたデータからその背後にある特徴を抽出し、実世界への利活用を行う人工知能の手法が開発されている。産業面では、次に出現するパターンを予測する時系列分析モデルの構築が求められている。このような背景の中、Deep Learning と呼ばれる機械学習法が登場し、特に、画像認識の分野で優れた有効性を示している⁴⁾。

Deep Learning とは、Hinton が提唱した階層型ニューラルネットワークにおける学習手法である⁵⁾。その最大の特徴はネットワーク全体を学習する前の事前学習であり、これは、各層ごとに逐次教師なし学習を行うことで入力データが持つ分布(事前知識)を事前に学習する手法である。事前学習した層を階層的に組み合わせることで、上位層に進むにつれて入力データの特徴を表す抽象的概念を獲得できる。この事前学習により、従来の階層型ニューラルネットワークにおける問題、すなわち、誤差逆伝搬法の学習において、出力層から入力層に向かうにつれて誤差が逆伝搬されにくくなる、過学習が生じる、などの問題を解決した。Restricted Boltzmann Machine(RBM)⁶⁾は尤度の概念を取り入れた統計的な手法であり、事前学習の一つの手法として知られている。Deep Belief Nets(DBN)⁷⁾は、複数の RBM において事前学習した入力データの部分的な特徴を階層的に組み合わせることで、入力データの全体的かつ具体的特徴を学習できる手法である。教師信号を持った学習

データの識別を行う場合は、事前学習の後、多層パーセプトロンなどによる教師あり学習(fine-tuning)が行われる。

Deep Learning は多くの分野で優れた成果を残しつつも、(1)最適なネットワーク構造は入力データの分布に応じて異なり、パラメタ設定は試行錯誤的に求める必要がある、(2)学習後のネットワーク構造はブラックボックスであり、学習結果の利活用、すなわち知識獲得が困難であることが知られている。(1)の問題を解決するために、文献⁸⁾では、階層型ニューラルネットワークにおいて、学習中に更新される重みベクトルの変分を用いて隠れニューロンの生成/消滅を行い、適切な大きさのネットワーク構造を学習中に自動で求める構造適応型学習手法を提案している。また、(2)の問題を解決するために、文献⁹⁾では学習中に重みの値が過剰に大きくなるのを抑制する手法が提案されている。さらに、文献¹⁰⁾では、階層型ニューラルネットワークにおいて学習後のネットワークの重みを正規化し、隠れニューロンの出力値をスパースにすることで、出力値の意味付けを行う忘却学習が提案されている。本研究では、これらの階層型ニューラルネットワークの手法を統計的な手法である RBM に適用し、RBM の学習中に最適な隠れニューロンを入力データ空間に応じて適応的に定めるニューロン生成/消滅アルゴリズムを開発し、文献¹¹⁾においてその有効性を示した。また、文献¹²⁾では、忘却機能を持った RBM の構造適応型学習手法を開発した。これらの RBM の手法は従来の手法と比べて優れた分類精度を示したが¹³⁾、一方で、より詳細な特徴を学習するためには、DBN による階層化学習を行う必要があることが分かった。本論文では、DBN において、入力データに応じて最適な隠れ層の数を学習中に定める構造適応型 DBN の学習手法を提案する。ここでは、構造適応型 RBM におけるニューロン生成アルゴリズムを応用し、ネットワーク全体のモデルの

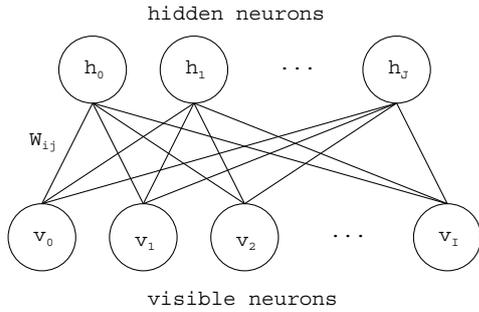


Fig. 1: Structure of RBM

安定性をモニタリングし、必要な場合に層の生成を行う階層化アルゴリズムを提案する。提案手法を画像ベンチマークデータセット CIFAR-10¹⁴⁾ に適用したところ、従来の DBN よりも高い分類精度が得られたため、ここに報告する。

2 構造適応型 Restricted Boltzmann Machine による学習手法

2.1 Restricted Boltzmann Machine

RBM⁶⁾ は、可視層と隠れ層の2層から構成されるネットワーク構造を持ち、確率分布に基づいて入力データに含まれる特徴を隠れニューロン上で学習することができる。従来の Boltzmann Machine¹⁷⁾ では、各層のニューロン同士に相互結合があるが、RBM では、Fig. 1 のように各層のニューロン間の結合はない。このため、計算量を削減するだけでなく、隠れ層の各ニューロンごとに独立した確率分布を学習することができる。

RBM の学習では、エネルギー関数を最小にするためのパラメタが最尤推定により求められる。ここで、 v_i を i 番目の可視ニューロン、 h_j を j 番目の隠れニューロンとしたとき、エネルギー関数 $E(\mathbf{v}, \mathbf{h})$ は式 (1) のように定義され、また入力 \mathbf{v} と \mathbf{h} の尤度 $p(\mathbf{v}, \mathbf{h})$ は式 (2) のように定義される。ここで、 $\mathbf{v} \in \{0, 1\}^I$ と $\mathbf{h} \in \{0, 1\}^J$ はそれぞれ可視層と隠れ層のベクトルであり、 I と J は可視ニューロンの数、隠れニューロンの数である。

$$E(\mathbf{v}, \mathbf{h}) = \sum_i b_i v_i - \sum_j c_j h_j - \sum_i \sum_j v_i W_{ij} h_j, \quad (1)$$

$$p(\mathbf{v}, \mathbf{h}) = \frac{1}{Z} \exp(-E(\mathbf{v}, \mathbf{h})), \quad (2)$$

$$Z = \sum_{\mathbf{v}} \sum_{\mathbf{h}} \exp(-E(\mathbf{v}, \mathbf{h})), \quad (3)$$

ここで、 b_i は v_i に対するパラメタ、 c_j は h_j に対するパラメタ、 W_{ij} は v_i と h_j 間の重みである。また Z は分配関数 (partition function) であり、 \mathbf{v} と \mathbf{h} の全ての可能な組み合わせに対するエネルギーを示す。RBM の学習では、入力データの確率分布を表現するためのパラメタ $\theta = \{\mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{W}\}$ を最尤推定により求めることができる。ただし、計算量の観点から厳密な解を求めることは困難であるため、一般的には、サンプリングに基づいた Contrastive Divergence (CD) 法¹⁵⁾ による近似が行われる。CD 法における最適なサンプリング回数については議論がされているが、サンプリング数が 1 回 (CD-1) でも性能が高いことが知られている¹⁶⁾。

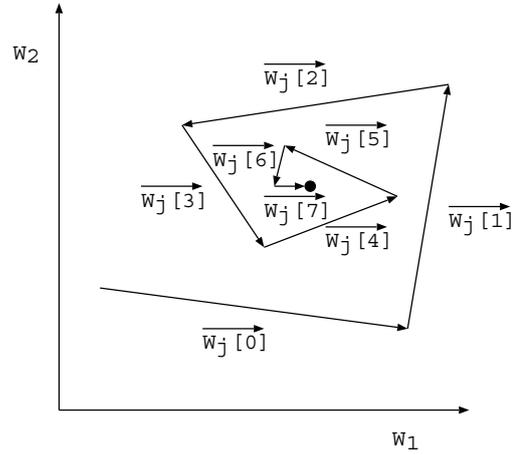


Fig. 2: Convergence situation of a weight vector

2.2 ニューロン生成/消滅アルゴリズムによる構造適応型学習

我々は、階層型ニューラルネットワークにおける文献⁸⁾ の手法に基づき、RBM の学習中において最適な隠れニューロン数を自動で求めるニューロン生成/消滅アルゴリズムによる構造適応型学習手法を提案している¹¹⁾。文献⁸⁾ では、自動生成したネットワークの最適性を凸性および連続性を用いて証明しているが、RBM の学習では、CD 法によるサンプリングの過程で、条件付き確率である連続値が 2 値に変換されてしまうため、連続性を満たさない場合があると我々は考えている。これに対して、先行研究では、学習における各パラメタの変分を一定の範囲内に収めることで、学習が収束することをリップシツツ連続性を用いて証明している¹⁸⁾。Fig. 2 は、学習が進むにつれて重みベクトルの変分が収束していく過程を示している。一方で、この条件を満たさず、パラメタの変分が収束しない場合は、学習データに対するネットワークの表現能力が不足しており、データが持つ特徴 (確率分布) を隠れニューロン上で線形分離できていないことが原因だと考えられる。このような場合、関連する位置に十分な数の隠れニューロン挿入することで、連続性を満たさないまでも、多くの次元でデータを表現できると考えられ、ネットワークが安定し、収束する。我々の調査では、RBM の3つのパラメタ $\theta = \{\mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{W}\}$ のうち、 \mathbf{c} と \mathbf{W} が CD 法による学習の収束に関係していることを発見し¹⁹⁾、ニューロン生成の条件を式 (4) に示すように定義した。

$$(\alpha_c \cdot dc_j) \cdot (\alpha_w \cdot dW_{ij}) > \theta_G, \quad (4)$$

ここで、 dc_j 、 dW_{ij} は、それぞれ j 番目の隠れニューロンのパラメタの勾配、 i, j 番目の重みの勾配を示し、 α_c 、 α_w は、各パラメタの勾配のスケールを調整するために使われるパラメタであり、 θ_G は閾値である。学習中に式 (4) を満たす隠れニューロンがある場合、Fig. 3(a) のように、該当する隠れニューロンの近傍に新しいニューロンがその属性 (パラメタや重みの値) を継承するように挿入される。

一方、入力データに対して十分な数の隠れニューロンが生成された後、その中に出力に寄与していない、すなわち冗長な値を出力する隠れニューロンが存在する

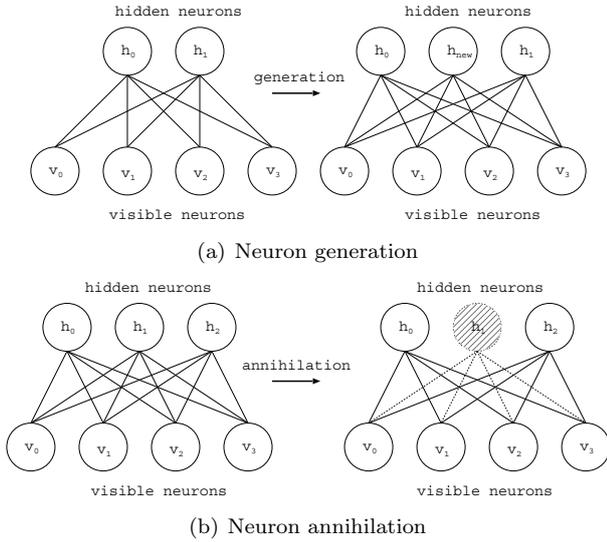


Fig. 3: Adaptive Learning method of RBM

場合がある。このようなニューロンがある場合、学習に係る計算的コストが増加するだけでなく、ネットワークの構造が複雑になり、誤った出力を生じる場合がある。提案する構造適応型 RBM では、一定の学習の後、式 (5) を満たす隠れニューロンが存在すれば、ニューロン消滅アルゴリズムを適用し、該当する隠れニューロンを Fig. 3(b) のように消去する。式 (4) では、すべての入力データに対する隠れニューロンの出力値の平均をモニタリングし、その値が一定の閾値以下のニューロンを冗長なニューロンとみなし、削除している。

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N p(h_j = 1 | \mathbf{v}_n) < \theta_A, \quad (5)$$

$$p(h_j = 1 | \mathbf{v}_n) = \text{sigm}(b_j + \sum_i W_{ij} v_i), \quad (6)$$

ここで、 $\mathbf{v}_n = \{v_1, v_2, \dots, v_N\}$ は与えられた入力データセットであり、 N はそのレコード数である。 $p(h_j = 1 | \mathbf{v}_n)$ は RBM の可視層に入力データ \mathbf{v}_n が与えられたときの隠れニューロン $h_j \in \{0, 1\}$ の発火確率を示している。ここで、 $\text{sigm}()$ はシグモイド関数で $[0, 1]$ を出力する関数である。 θ_A はしきい値である。

2.3 忘却機能を持った構造学習

RBM によるニューロン生成/消滅アルゴリズムにより、入力データ空間に応じて最適なネットワーク構造を学習中に求めることができるが、学習後のネットワーク構造はブラックボックスである。従って、ネットワークに蓄積された重みや隠れニューロンの出力値と、入力データとの関係性が不明確であり、そこから IF-THEN ルールで表現されるような明示的な知識の獲得は困難である。このような問題を解決するため、石川は、階層型ニューラルネットワークにおいて、ネットワークから知識獲得を行うための忘却付き構造学習法を提案している¹⁰⁾。ここでは、“忘却学習”、“隠れユニット明確化”、“選択的忘却学習”の3つの手続きによりネットワークの正則化を行い、スパースな構造をもつニューラルネットワークを構成している。我々は、この手法に基づいた RBM の忘却学習手法を開発し、文献¹³⁾においてその有効性を示している。

式 (7) から式 (9) は、忘却学習による3種類の目的関数を示しており、それぞれ忘却学習、隠れユニット明確化、選択的忘却学習を示している。

$$J_f = J + \sum_{i,j} |w_{ij}|, \quad (7)$$

$$J_h = J + \sum_i \min\{1 - h_i, h_i\}, \quad (8)$$

$$J_s = J + \sum_{|w_{ij}| < \theta} |w_{ij}|, \quad (9)$$

ここで、 J は学習における通常の目的関数であり、RBM の場合は CD 法の推定により生じる誤差を示している。式 (7) の忘却学習では、重みの絶対値の和を目的関数に加えている。これは、L1 正則化の効果があり、重みが必要以上に大きくなることを抑制している。式 (8) の隠れユニット明確化では、隠れユニットにおける出力を強制的に2値化するように評価する項を追加している。式 (9) の選択的忘却学習では、式 (7) の忘却学習によって目的関数の値が通常より大きくなってしまったことを避けるために、しきい値の範囲内の重みに限定して忘却学習を行っている。これらの式を各パラメタに対して偏微分することで学習におけるパラメタの修正量を求めることができる。RBM では、式 (1) に示すようにパラメタ \mathbf{c} と \mathbf{W} が隠れニューロン \mathbf{h} に関連していることから、式 (10) および式 (11) の右辺の第3項が忘却学習による勾配として、通常の CD 法におけるパラメタの更新式に追加される。

$$\Delta w_{ij} = v_i p(h_j = 1 | \mathbf{v}) - v_i' p(h_j = 1 | \mathbf{v}') - \frac{\lambda_1}{2} \text{sgn}(w_{ij}), \quad (10)$$

$$\Delta c_j = p(h_j = 1 | \mathbf{v}) - p(h_j = 1 | \mathbf{v}') - \frac{\lambda_2}{2} (1 - p(h_j = 1 | \mathbf{v})), \quad (11)$$

ここで、 λ_1 と λ_2 はそれぞれ重みと隠れニューロンの修正量を調整するパラメタである。文献¹⁰⁾で提唱されているように、忘却学習と隠れユニットの明確化は学習中に同時に適用するべきである(選択的忘却学習は、最終的な誤差を小さくするために学習の後半に適用する)。我々の調査では、RBM の学習において λ_1 と λ_2 を異なる値に設定した場合、 \mathbf{W} と \mathbf{c} の収束状況において偏りが見られたため、同じ値 ($\lambda_1 = \lambda_2 = 1$) とした。

3 構造適応型 Deep Belief Network による学習手法

Deep Belief Network (DBN) は、Hinton が提案した Deep Learning の手法であり、事前学習した RBM を複数積み重ねることで、入力データの特徴を階層的に学習することができる⁷⁾。Fig. 4 は、3つの RBM を持つ DBN のネットワーク構造を示している。入力層を0層とした際、 $l (> 0)$ 層のエネルギーは式 (12) のように定義される。また、 l 層の j 番目の隠れニューロンの発火確率は式 (13) のように定義される。

$$E^l = E(\mathbf{h}^{l-1}, \mathbf{h}^l) = (\mathbf{b}^l)^T \mathbf{h}^{l-1} - (\mathbf{c}^l)^T \mathbf{h}^l - \mathbf{h}^{l-1} \mathbf{W}^l \mathbf{h}^l, \quad (12)$$

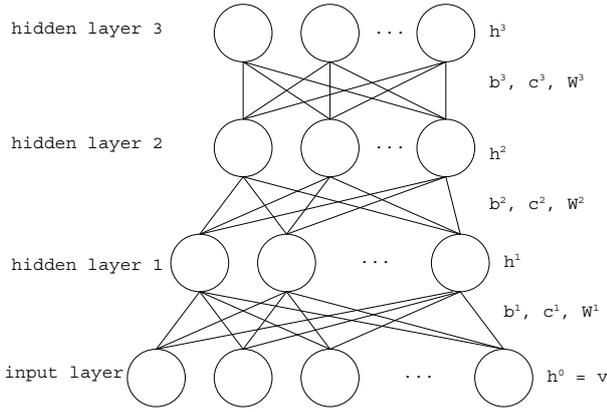


Fig. 4: Hierarchical network structure of DBN

$$p(h_j^l = 1 | \mathbf{h}^{l-1}) = \text{sigm}(\mathbf{c}^l + \mathbf{W}^l \mathbf{h}^{l-1}), \quad (13)$$

ここで、 \mathbf{b}^l 、 \mathbf{c}^l はそれぞれ l 層の RBM の可視ニューロンと隠れニューロンのパラメタであり、 \mathbf{W}^l はその重みである。 $\mathbf{h}^l \in \{0, 1\}$ は隠れニューロンの状態ベクトルである。

本論文では、DBN の学習中において、入力データに対して最適な隠れ層の数を自動で求める構造適応型学習手法を提案する。構造適応型 RBM におけるニューロン生成アルゴリズムでは、学習中の WD (パラメタ \mathbf{c} と \mathbf{W} の変分) をモニタリングしたが、提案する構造適応型 DBN では、個々の RBM の安定性ではなく、ネットワーク全体の安定性を測るため、ネットワーク全体の WD およびエネルギーを式 (14) に示すように観察した。

$$\sum_{l=1}^k (\alpha_{WD} \cdot WD^l + \alpha_E \cdot E^l) > \theta_L, \quad (14)$$

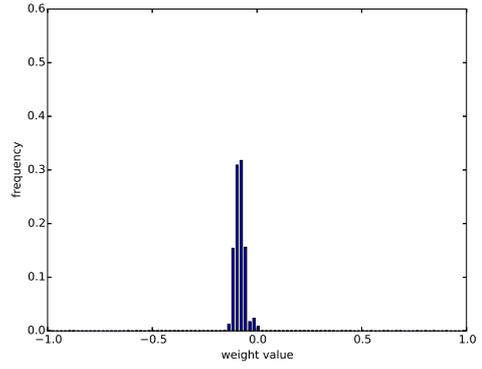
ここで、 WD^l は l 層の RBM における \mathbf{c}^l と \mathbf{W}^l の変分を示している。 E^l はエネルギー関数である。 α_{WD} と α_E はスケールを調整するために使われるパラメタであり、 θ_L は閾値である。ある k 層の RBM の学習中に式 (14) を満たす場合、入力データに対するネットワーク全体の表現能力が不足していると考え、 k 層の学習が終了した時点で、 $k+1$ 層の RBM を生成し、学習を行う。ここでも RBM のニューロン生成アルゴリズムと同様に、 $k+1$ 層の RBM のパラメタ \mathbf{b} 、 \mathbf{c} 、 \mathbf{W} の初期値が k 層の RBM から継承される。

4 実験

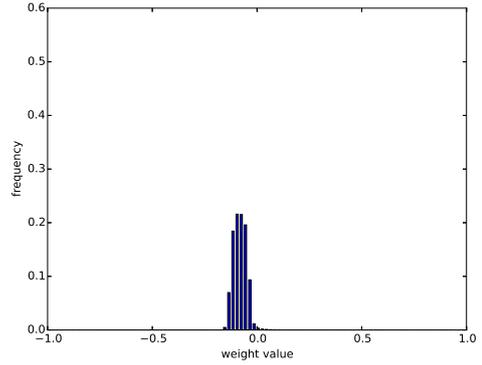
4.1 データセット

提案する構造適応型 DBN の性能を評価するために、CIFAR-10¹⁴⁾ と呼ばれるカラー画像データセットを用いた識別実験を行った。CIFAR-10 は、50,000 枚の訓練画像と 10,000 枚のテスト画像から構成され、訓練画像とテスト画像間に重複する画像はない。これらの画像は車、犬などの 10 種類のクラスを持ち、各画像は 32×32 ピクセルである。

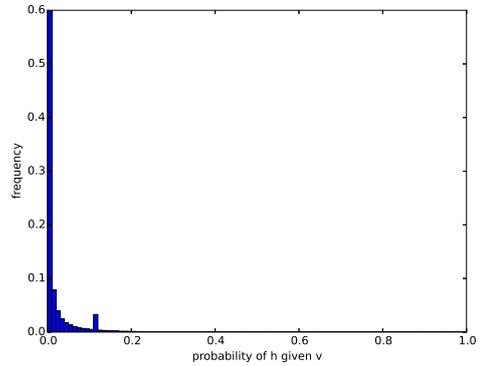
RBM, DBN の実装には、Pylearn2²¹⁾ と呼ばれる Deep Learning のライブラリを用いた。学習アルゴリズムには Stochastic Gradient Descent (SGD) を用い、学



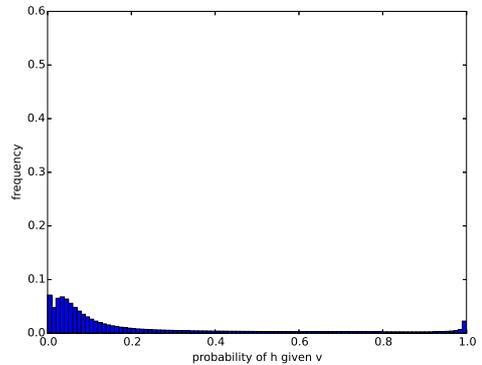
(a) Weights in even (2th) layer



(b) Weights in odd (3th) layer



(c) Outputs in even (2th) layer



(d) Outputs in odd (3th) layer

Fig. 5: Distribution of trained weights and output activities in hidden neurons

Table 1: Classification Accuracy

	Training	Test
Traditional RBM ²²⁾	-	63.0%
Traditional DBN ²³⁾	-	78.9%
Adaptive RBM	99.9%	81.2%
Adaptive RBM with Forgetting	99.9%	85.8%
Adaptive DBN with Forgetting	100.0%	92.4%

Table 2: Situation in each layer after training of adaptive DBN

Layer	No. neurons	Total energy	Total error	Accuracy
1	433	-0.24	25.37	84.6%
2	1595	-1.01	10.76	86.2%
3	369	-0.78	1.77	90.6%
4	1462	-1.00	0.43	92.3%
5	192	-1.17	0.01	92.4%

習率は0.1, 学習のバッチサイズは100とした. 構造適応型RBMのパラメタとして, $\theta_G = 0.015$, $\theta_A = 0.0005$ とした. 構造適応型DBNのパラメタとして, $\theta_L = 0.1$ とした.

4.2 実験結果

Table 1は, CIFAR-10の訓練事例とテスト事例に対する識別精度を示している. 従来のRBM²²⁾やDBN²³⁾に比べて, 提案する構造適応型RBMは高い識別精度を示し, さらに, 忘却学習を適用することでテスト事例に対する識別精度が向上した. この中でも, 本論文で提案する構造適応型DBNは訓練事例だけでなくテスト事例に対して最も高い分類精度を示すことができた.

Table 2は, 構造適応型DBNにおける各層の学習状況を示している. 上位層に進むにつれて, エネルギーや誤差は小さくなり, 識別精度は向上した. 4層から5層にかけて, エネルギーや誤差の変化が少なくなり, 式(14)による層の自動生成は5層で終了した. また, 興味深いことに, 奇数の層(1, 3, 5)において隠れニューロン数が少なくなり, 偶数の層(2, 4)において隠れニューロン数が多くなった. 隠れニューロン数が多い層では, 入力データの一般的な特徴がラフに分類され, 隠れニューロン数が少ない層では, 前の層で分類した特徴の組み合わせにより, 詳細で具体的な特徴が隠れニューロン上で表現されたのだと考えられる. このような特徴は, 学習後の重みや隠れニューロンの出力値の分布にも現れている. 偶数の層では, Fig. 5(c)のように, ニューロン出力値がスパースになり, 奇数の層では, Fig. 5(d)のように, 0もしくは1以外を出力するニューロンが増加し, 複雑な特徴を表現する隠れニューロンが生成された.

5 おわりに

Deep Learningと呼ばれる機械学習の手法が様々な分野で高い精度を示しており, 現実世界の問題に応用されている. これらは特に画像認識の分野で優れた成果を残しているが, 入力データ空間に応じたネットワーク構造の最適化や学習結果の可視化の課題は解決されていない. また, Deep Learningの手法として, 畳込みニューラルネットワークがよく使われているが, 計

算量が多いため高価なハードウェアが必要なことが問題である. 本研究では, 尤度の概念を用いた統計的なモデルであるため, 構造の最適性の証明や学習結果の可視化に優れているRBM, DBNに着目し, 学習中にニューロンの生成/消滅を行うことで最適な構造を求める構造適応型DBNを開発した. ここでは, 学習中におけるネットワーク全体のパラメタの変分とエネルギーを観察し, これらの値が一定のしきい値を超えた場合, 新しいRBMの層を生成する階層化の条件を提案した. 画像データセットを用いた識別実験を行ったところ, 実験の結果, 本論文で提案する構造適応型DBNは高い分類精度を持つことが分かった. 今後は, 学習後のネットワーク構造の可視化を行い, ネットワークに蓄積されている有用な情報をIF-THENルールのような明示的な知識を獲得する手法を開発する.

参考文献

- 1) N.D.Lane, E.Miluzzo, L.Hong, D.Peebles, T.Choudhury and A.T.Campbell: *A survey of mobile phone sensing*, IEEE Communications Magazine, Vol.48, No.9, 140/150 (2010)
- 2) T.Lyons and M.Skitmore: *Project risk management in the Queensland engineering construction industry : a survey*, International Journal of Project Management, Vol.22, No.1, 51/61 (2012)
- 3) M.Suka, T.Ichimura and K.Yoshida: *Development of coronary heart disease databases*, Proc. of the 8th International Conference on Knowledge-Based Intelligent Information & Engineering Systems (KES2004), Vol.2, 1081/1088 (2004)
- 4) V.Le.Quoc, R.Marc's Aurelio, et.al: *Building high-level features using large scale unsupervised learning*, International Conference in Machine Learning (2012)
- 5) Y.Bengio: *Learning Deep Architectures for AI*. Foundations and Trends in Machine Learning archive, Vol.2, No.1, 1/127 (2009)
- 6) G.E.Hinton: *A Practical Guide to Training Restricted Boltzmann Machines*. Neural Networks, Tricks of the Trade, Lecture Notes in Computer Science, Vol.7700, 599/619 (2012)
- 7) G.E.Hinton, S.Osindero and Y.Teh: *A fast learning algorithm for deep belief nets*. Neural Computation, Vol.18, No.7, 1527/1554 (2006)
- 8) T.Ichimura and K.Yoshida Eds.: *Knowledge-Based Intelligent Systems for Health Care*. Advanced Knowledge International (ISBN 0-9751004-4-0) (2004)

- 9) M.Ranzato, Y.Boureau and Y.LeCun: *Sparse Feature Learning for Deep Belief Networks*. Advances in Neural Information Processing Systems 20 (NIPS 2007), 1185/1192 (2007)
- 10) M.Ishikawa: *Structural Learning with Forgetting*. Neural Networks, Vol.9, No.3, 509-521 (1996)
- 11) S.Kamada and T.Ichimura: *An Adaptive Learning Method of Restricted Boltzmann Machine by Neuron Generation and Annihilation Algorithm*. Proc. of IEEE SMC 2016, (to appear in 2016)
- 12) S.Kamada, Y.Fujii and T.Ichimura: *Structural Learning Method of Restricted Boltzmann Machine with Forgetting*. Proc. of 17th Annual Meeting of Self-Organizing Maps in Japanese, 13.1/6 (2016)
- 13) S.Kamada and T.Ichimura: *A Structural Learning Method of Restricted Boltzmann Machine by Neuron Generation and Annihilation Algorithm*. ICONIP 2016, (submitted)
- 14) A.Krizhevsky: *Learning Multiple Layers of Features from Tiny Images*. Master of thesis, University of Toronto (2009)
- 15) G.E.Hinton: *Training products of experts by minimizing contrastive divergence*. Neural Computation, Vol.14, 1771/1800 (2002)
- 16) T.Tieleman: *Training restricted Boltzmann machines using approximations to the likelihood gradient*, Proc. of the 25th international conference on Machine learning, 1064-1071 (2008)
- 17) D.H.Ackley, G.E.Hinton and T.J.Sejnowski: *A Learning Algorithm for Boltzmann Machines*, Cognitive Science, 9: 147-169. doi, 10.1207/s15516709cog0901.7 (1985)
- 18) D.Carson, V.Cevher and L.Carin: *Stochastic Spectral Descent for Restricted Boltzmann Machines*. Proc. of the Eighteenth International Conference on Artificial Intelligence and Statistics, 111-119 (2015)
- 19) S.Kamada and T.Ichimura: *A Learning Method of Adaptive Deep Belief Network by using Neuron Generation and Annihilation Algorithm*. Proc. of 17th Annual Meeting of Self-Organizing Maps in Japanese, 12.1/6 (2016)
- 20) A.Coates, A.Ng and H.Lee: *An Analysis of Single-Layer Networks in Unsupervised Feature Learning*, Journal of Machine Learning Research - Proceedings Track 15:215-223 (2011)
- 21) I.Goodfellow, David Warde-Farley, et.al.: *Pylearn2: a machine learning research library*, arXiv preprint arXiv:1308.4214 (2013)
- 22) S.Dieleman and B.Schrauwen: *Accelerating sparse restricted Boltzmann machine training using non-Gaussianity measures*. Deep Learning and Unsupervised Feature Learning (NIPS-2012) (2012)
- 23) A.Krizhevsky, A Convolutional: *A Convolutional Deep Belief Networks on CIFAR-10*, Technical report (2010)