

TR-H-047

ニューロン系のエネルギー最小化による
最適解探索に関する研究

五十嵐 治一

1994. 1. 28

ATR 人間情報通信研究所

〒619-02 京都府相楽郡精華町光台2-2 ☎07749-5-1011

ATR Human Information Processing Research Laboratories

2-2, Hikaridai, Seika-cho, Soraku-gun, Kyoto 619-02 Japan

Telephone: +81-7749-5-1011

Facsimile: +81-7749-5-1008

ニューロン系のエネルギー最小化による
最適解探索に関する研究

Optimization Methods Using Energy Minimization
In Neuron Systems

五十嵐 治一

Optimization Methods Using Energy Minimization In Neuron Systems

[Abstract]

This paper deals with a neural computation approach that uses energy minimization to solve optimization problems. First, we propose a new method based on Hopfield's model, "Neural Relaxation Labeling Method", to solve problems of matching and recognizing patterns which consist of several straight line segments. Compatibility coefficients are usually calculated using a linear combination of several feature functions that represent disagreements between two pairs of primitives. Parameters, including proportional coefficients by which the feature functions are multiplied, can be determined by using a steepest descent method to decrease the value of the error function. Our simulations indicate that the present method, which uses the parameters mentioned above, has achieved more accurate matching and a higher level of recognition than those achieved by the classical relaxation labeling method by Rosenfeld, Hummel and Zucker.

Second, we propose a "Two-layer Random Field Model" (TRFM) to solve general combinatorial optimization problems and ill-posed problems within the framework of energy minimization. The new model consists of two layers of random fields. The lower layer is a random field that generates candidates for the optimal solution. Its probability distribution function is given by a Gibbs distribution function using an energy and a temperature. The upper layer is a field where constraints are represented. The two fields are loosely combined using a conditional probability. The values of parameters in the energy function, the regularization parameter or the weights of constraint terms, can be adjusted by our updating rule so that the energy minimum state satisfies the constraints represented on the upper layer. The energy minimum state can be found using the simulated annealing method, which enables TRFM to deal with non-linear or complicated energy functions.

In order to verify the parameter updating rule and the ability to find the optimal solution, we applied TRFM to three problems: image restoration using edge information, edge restoration from feature points and the traveling salesman problem. Experimental results show the effectiveness of TRFM for solving ill-posed problems and combinatorial optimization problems.

— 目次 —

	ページ
要約	
第 I 章 序論	1
I.1 ニューロコンピューティングについて	1
I.2 本論文の構成	7
第 II 章 最適解探索のためのニューラルネットワークモデル	10
II.1 確率的モデルとシミュレーテッド・アニーリング	10
II.2 決定論的モデルと平均場アニーリング	14
第 III 章 ニューラルネットワークモデルのパターンマッチングへの の応用	18
III.1 緩和ラベリング法とHopfield-Tankモデル	18
III.2 ニューラル緩和ラベリング法の提案 - 線画マッチングへの応用 -	24
III.2.1 ニューラル緩和ラベリング法	24
III.2.2 Rosenfeld 型の緩和ラベリング法	29
III.2.3 実験	30
III.2.4 実験結果と考察	33
第 IV 章 2層確率場モデルによる逆問題の解法	38
IV.1 エネルギー最小化と逆問題	38
IV.2 視覚情報処理における逆問題とニューロコンピューティング	40
IV.2.1 標準正則化理論	40
IV.2.2 結合MRFモデル	42
IV.2.3 川人-乾の視覚情報処理モデル	43
IV.3 2層確率場モデルの一般論	45
IV.3.1 2層確率場モデル	46
IV.3.2 従来のモデルとの比較・関連	50
IV.4 2層確率場モデルと組合わせ最適化問題	56
IV.4.1 数理計画問題の解法 - 従来法 -	56
IV.4.2 ニューロコンピューティングによる組合わせ最適化問題 の解法	59
IV.4.3 2層確率場モデルによる組合わせ最適化問題の解法	61

第 V 章 2 層確率場モデルの検証と応用	68
V.1 エッジ情報を用いた画像修復への応用	68
V.1.1 背景	68
V.1.2 エネルギー関数	69
V.1.3 並列処理化されたパラメータ更新ルール	73
V.1.4 全体の処理の流れ	74
V.1.5 実験	75
V.1.5.1 画像データとエッジ情報	75
V.1.5.2 熱平衡状態の生成	75
V.1.5.3 実験条件	76
V.1.5.4 実験結果と考察	77
V.1.6 検討 -平均場近似の適用-	79
V.2 特徴点を用いたエッジ修復への応用	83
V.2.1 背景	83
V.2.2 全体の処理の流れ	85
V.2.3 実験	86
V.2.3.1 エッジ画像の作成	86
V.2.3.2 特徴点の抽出	87
V.2.3.3 エネルギー関数	89
V.2.3.4 条件付き確率 $P(\omega'_0 \omega)$	92
V.2.3.5 エッジ整形のための後処理	92
V.2.3.6 実験結果と考察	93
V.3 巡回セールスマン問題への応用(I)	98
V.3.1 背景	98
V.3.2 エネルギー関数	99
V.3.3 制約条件満足度	100
V.3.4 パラメータ更新ルール	101
V.3.5 制約条件満足度の目標値の設定	101
V.3.6 全体の処理の流れ	103
V.3.7 実験 1	103
V.3.8 実験 2	107
V.3.9 考察	109
V.4 巡回セールスマン問題への応用(II) - 平均場近似 -	110
V.4.1 背景	110
V.4.2 平均場近似とアニーリング	112
V.4.3 平均場近似が適用された 2 層確率場モデル	113

V.4.4	パラメータ更新ルール	114
V.4.5	巡回路検出処理	116
V.4.6	全体の処理の流れ	117
V.4.7	実験 -64都市の問題-	118
V.4.7.1	実験条件	118
V.4.7.2	実験結果	119
V.4.8	考察	122
V.5	その他の応用への検討	124
V.5.1	両眼立体視における奥行き知覚の計算論的モデルへの応用	124
V.5.1.1	研究の背景	124
V.5.1.2	Bulthoff-Fahleの奥行き知覚に関する心理物理実験	125
V.5.1.3	Yuille-Geiger-Bulthoffによる計算論的モデル	127
V.5.1.4	平均場近似と2層確率場モデルの適用	129
V.5.2	多目的最適化問題への応用 - 配送問題 -	133
V.5.2.1	研究の背景	133
V.5.2.2	配送問題	134
第 VI 章	まとめ	139
VI.1	本論文のまとめ	139
VI.2	今後の展開	141
謝辞		143
文献		144
付録		154
付録A.	シミュレーテッド・アニーリング法の原理	154
付録B.	特徴量の詳細	158
付録C.	パラメータ更新ルールの並列処理化	161
付録D.	パラメータ更新則における時間幅	163

【要約】

近年、脳の情報処理機構を擬したニューラルネットワークモデルを情報処理関連の諸問題に応用する研究が盛んである。こうした応用は、目的あるいは機能別に大きく次の3つに分けられる：(i)例示による近似関数の作成、(ii)カテゴリー分けのための識別空間の作成、(iii)ニューロン系のエネルギー最小化問題に帰着させることによる課題の解法。本論文で述べられているのは、(iii)の機能を持ったニューラルネットワークモデルに関する研究である。

まず、組合わせ最適化問題の解法として提案されたKirkpatrickらによるsimulated annealingを用いた方法やボルツマンマシンなどの確率的な動作を行なうモデルによる解法と、その平均場近似にあたり決定論的に動作するHopfieldらのモデルについて述べる。

次に、このうちのHopfieldらのモデルをベースにしたモデルをパターンマッチング(ラベリング)の問題に応用する。ここでは、従来から有力な方法として提案されてきたRosenfeldの緩和ラベリング法と、Hopfieldらのモデルが、近似的に等価であることを示し、従来は経験的に行なっていた適合係数の計算を学習により行なうことが可能なニューロモデル(ニューラル緩和ラベリング法)を提案し、それを2次元の線画マッチングの問題に適用した結果について述べる。

この例でも示されているが、一般に組合わせ最適化問題をエネルギー最小化問題に帰着させて解く際には、エネルギー関数中に未定の係数を含んでしまうのが普通である。なぜならば、エネルギー関数は、最小化したいコストを表した項と解に関する制約条件を表した項から構成されるのが一般的であるが、これらの項の重みをどのような値に設定すれば良いかということは簡単ではない場合が多いからである。特に、エネルギー関数が非線形演算子を含んだり、1次関数や2次関数でないような複雑な場合には、Lagrangeの未定乗数法や最急降下法では、大局的なエネルギー最小状態を求めるのは難しい。組合わせの最適化問題以外にも、一般の逆問題(既知の写像 $R:S \rightarrow I$ の下で、 I を与えて S を求める問題)はニューロン系のエネルギー最小化問題に帰着させることができる。そこで、エネルギー関数が非線形で、かつ、重み係数などの未知パラメータを含む場合に、未知パラメータを適切な値に調節しながらエネルギー最小状態を求めるという"2層確率場モデル"による方法を提案する。この方法は、元来は視覚情報処理やコンピュータビジョンにおける逆問題の解法として考案されたが、一般の逆問題の解法として広い汎用性を持っている。また、組合わせ最適化問題も、制約条件を与えてそれを満足する状態を求めるという一種の逆問題と見なすこともできるので、この2層確率場モデルを用いて解くことができる。

2層確率場モデルは、2つの確率場が階層構造をなしており、下層の確率場の状

態が与えられたときに上層の確率場の状態の起こりやすさを表した条件付き確率によってゆるやかに結合されている。下層の確率場は、最適解の候補を表現した確率場で、その確率分布はエネルギー関数と温度を用いたGibbs分布で与えられている。また、上層の確率場は解の満足すべき制約条件を表現している。2層の確率場の確率分布関数は、上記の条件付き確率で関係付けられているが、その形式は、統計物理でのくりこみ変換に類似している。対象となっている逆問題は、一旦、確率場間の逆問題に拡張され、下層のエネルギー関数中の未知パラメータを適切な値に調節するための"パラメータ更新ルール"が導き出される。また、エネルギー最小状態の探索は、下層の確率場の温度を下げること(アニーリング)により行なわれる。

従来、視覚情報処理における逆問題のニューロコンピューティングによるアプローチとして、標準正則化理論、結合MRFモデル、川人-乾の視覚情報処理モデルなどがエネルギー最小化の枠組みの中で提案されてきた。2層確率場モデルを用いた方法では、エネルギー関数中に非線形演算子を含むのが許され、順方向の写像(R)の導関数や逆関数を用いる必要がなく、未知パラメータの値も適切に自動調節できるという点で、これらのモデルにない長所を持っている。これらの長所は、逆問題の解法としてのみならず、組み合わせ最適化問題を含む一般の非線形計画問題の解法にも有効である。特に、複雑で多数の制約条件下での最適解探索に向いていると考えられる。

本論文では、2層確率場モデルの検証と実際の問題への応用をかねて、画像処理の分野では、エッジ情報を用いた画像修復の問題と、コーナーなどの特徴点の情報を用いたエッジ修復の問題を取り上げ、組み合わせ最適化問題の分野では、巡回セールスマン問題を取り上げた。巡回セールスマン問題では、さらに、2層確率場モデルに平均場近似を施すことも試みた。画像修復の問題と平均場近似を用いた巡回セールスマン問題の解法においては、ニューロンの動作などの処理を並列化することにより、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)を用いることが可能となった。これらの応用問題における実験を通して、パラメータ更新ルールの正当性が検証され、逆問題の解法と最適解の探索に2層確率場モデルがきわめて有効であることが実証できた。

さらに、上記以外の問題への応用として、両眼立体視における奥行き知覚の計算モデルとしての可能性と、巡回セールスマン問題よりはるかに複雑である配送問題への応用を検討した。前者の問題への応用を検討することは、脳における視覚情報処理の計算モデルとしての2層確率場モデルの可能性を探るものである。後者の問題は、多目的最適化問題の一例として、きわめて現実的で実用性の高い例題である。2層確率場モデルの実社会におけるインパクトのある応用が可能であるかを検討している。

第I章 序論

I.1 ニューロコンピューティングについて

近年、理学・工学の広範囲の分野においてニューラルネットワークモデルの研究が盛んである[Asou88]。これまで行なわれてきたニューロコンピューティングの研究の歴史[Amari89]を、脳に関する研究やコンピュータに関する研究と比較しながら図I.1-1に示す[Aihara88]。また、ニューロコンピューティングとその周辺の研究分野の様子を、図I.1-2に示す[Aihara88]。

医学、生理学、生物学では、解剖や動物実験を通して各生体組織の機能や結合状態などの、いわばハードウェアに関する研究が主として行なわれている[Fujisawa89]。これは、生体に直接に働きかける直接的なアプローチ法と言える。また、心理学や認知科学では、心理物理実験を通して外部から刺激を与えて人間の反応を観察することにより、人間の脳の内部で行なわれている情報処理機構に関する手掛かりを得るという間接的なアプローチ方法を採用している。いずれにせよ、これらの分野では、人間の脳やその他の生体内における情報処理機構の解明を第一の目的としている。

これに対して、工学におけるニューラルネットワークモデルの研究は、人間の情報処理機構の解明のためのモデルを提案する[Amari78][MATSC91][Ito89]とともに、さらにその長所を発展させた新しい情報処理のメカニズムを考案することを目的として、“脳に学ぶ”を合言葉に精力的な研究[JAI89][Science88]が世界的な規模で行なわれている。

従来、工学における情報処理とは、現在のデジタル計算機において主流となっている、逐次直列方式による情報処理を意味してきた。超LSIなどのハードウェアの進歩により、この方式に基づいた計算機が飛躍的な進歩をとげたのは周知の事

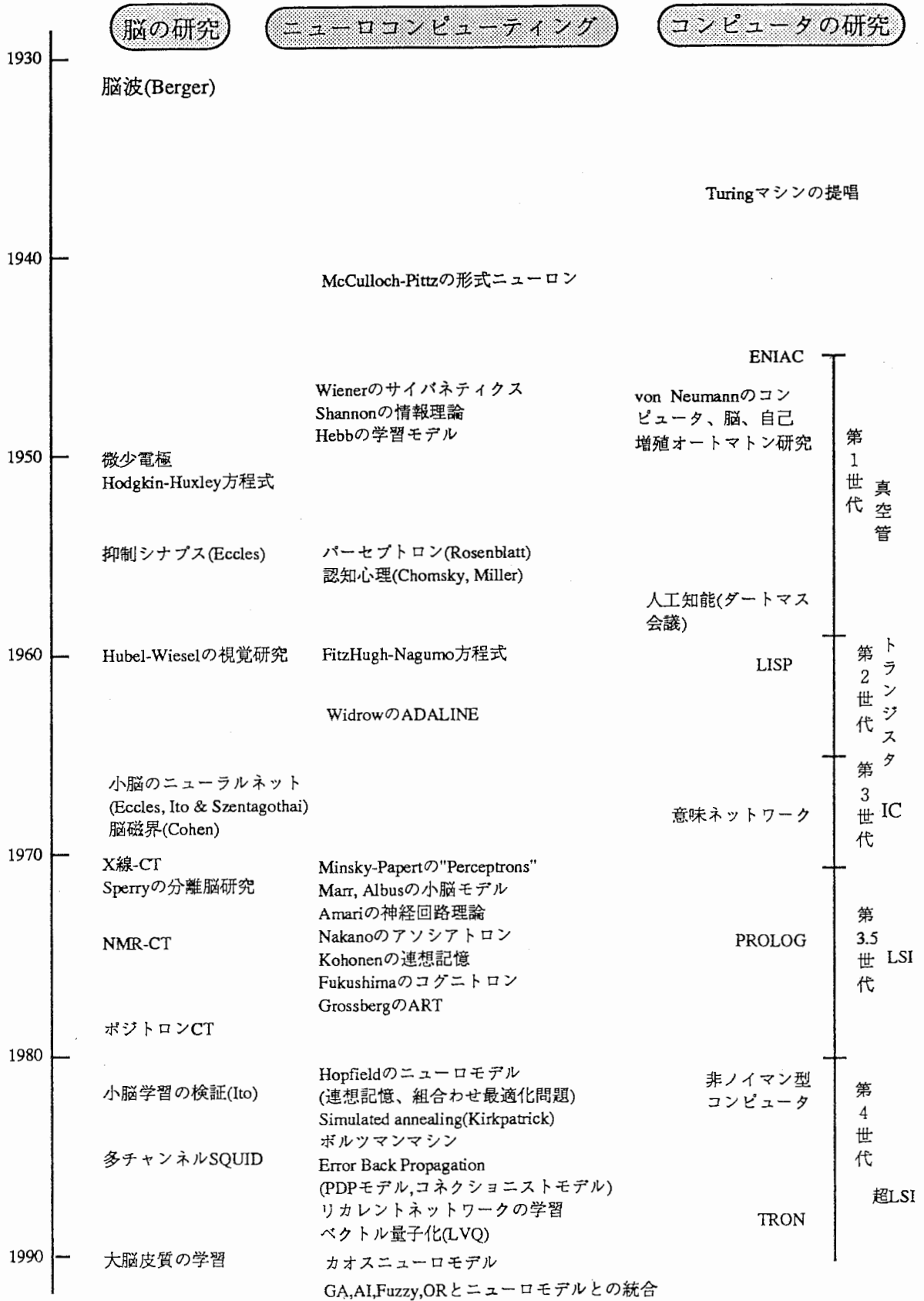


図 I.1-1 ニューロコンピューティングの研究の流れ([Aihara88]に一部加筆).

実である。しかも、数値計算というような数値データの処理だけではなく、論理的な推論を記号処理により取り扱うことが試みられ、1970年代後半から1980年代のいわゆる”人工知能ブーム”をもたらすこととなった。その結果、プロダクションシステムに代表される、”知識データベース+記号推論”という処理方式に基づいて、各種のエキスパートシステム[JAI88,91][Nikkei91]、自動翻訳システム、画像理解システムなどの知的システムが多数構築されるに至った[Tanaka84]。これらの記号情報処理方式は、人間の論理的な思考、論理的推論に対応しており、その点が”人工知能”と呼ばれる所以である。

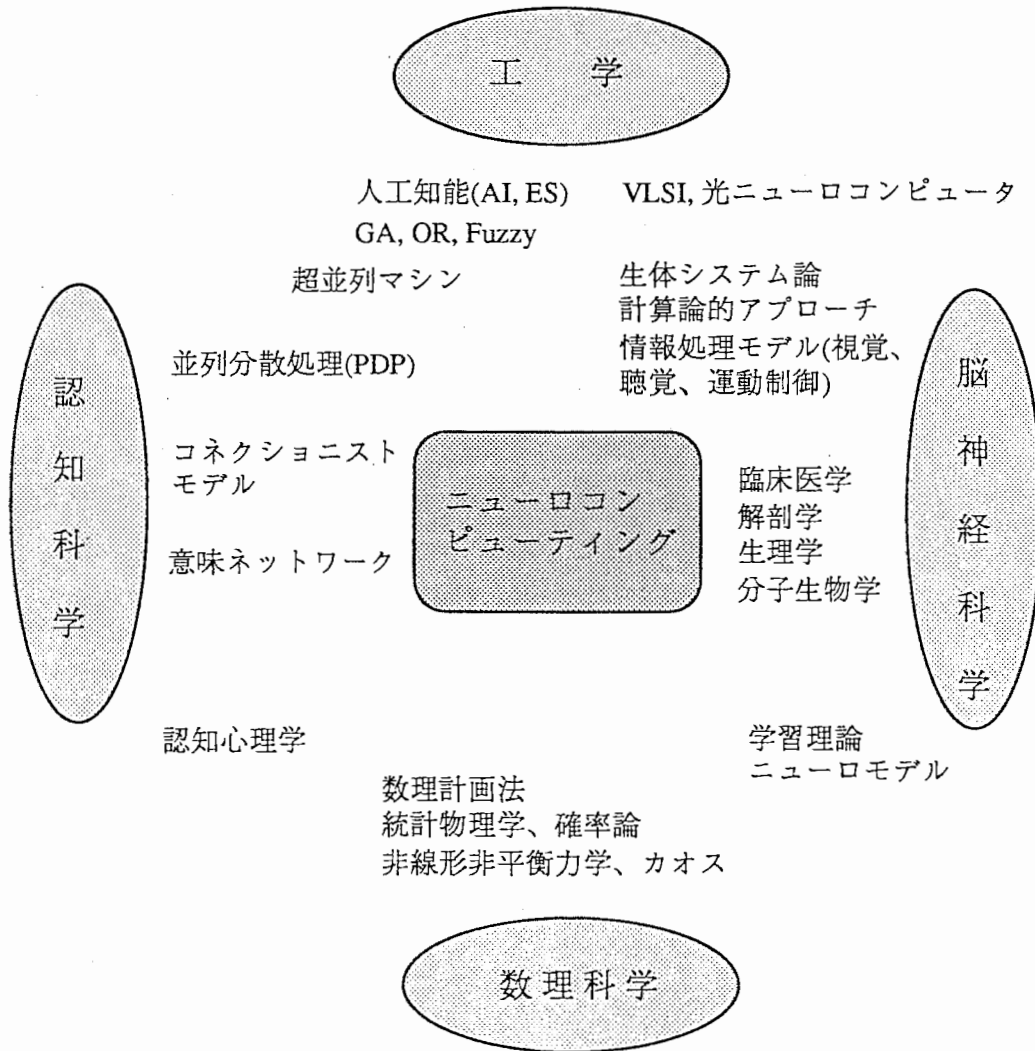


図 I.1-2 ニューロコンピューティングと周辺分野([Aihara88]に一部加筆).

しかしながら、人間の持つ情報処理方式は、こうした論理的な思考だけではない。これ以外の、人間の持つ情報処理の特徴を列挙すると、

- 1) 多数のニューロ素子の相互作用による超並列性。
- 2) ニューロンパターンによる情報の分散表現とロバスト性。
- 3) シナプスの可塑性による学習。

などが挙げられる。人間の視覚系、聴覚系、運動系における、記憶、認識、生成などの情報処理は、ニューラルネットを用いた上記3つの特徴を有する処理方式で行なわれている。1980年代に入って、こうした人間の持つニューラルネットワークによる情報処理方式が、再び見直されてきている。それには多くの理由がある[Okabe88][Amari89]が、次のようにまとめられるであろう。

- 1) 論理的推論による人工知能(AI)の限界。
- 2) 逐次直列処理型計算機の限界と、超並列プロセッサやニューロチップなどの作成を可能としたデバイス技術の発達。
- 3) 多層パーセプトロンにおける誤差逆伝播学習(Back Propagation)の成功 [Rumelhart86]や、連想記憶モデルの考案、組み合わせ最適化問題への応用、確率的動作を行なうニューロモデルの提案。

(→ニューロン素子の動作と処理方式との簡潔さが多くの研究者の関心を呼んだ。)

- 4) 脳の計算論的モデルとしてのニューロモデルの成功。
- 5) 神経生理学の進歩。
- 6) 物理学者の参入による理論的な進展や、物理学における概念や手法の導入。
- 7) 安価で高速なワークステーションの普及。

こうした背景をベースにして、ニューラルネットワークモデルを用いた情報処理方式の研究は、工学の分野で広く行なわれている[JAI89][Nikkei90,92]。組合わせ最適化問題、コンピュータビジョン、パターン認識、機械制御、信号処理、自動検査・判別などが代表的な応用分野の一例としてあげられる。これらの応用は、ニューラルネットワークの目的あるいは機能別に、次の3つに大別することができる。第1の応用は、例示からの近似関数の作成であり、多層パーセプトロンタイプのニューラルネットワークを用いた誤差逆伝播法による学習[Rumelhart86]が典型的な例である。このほかにも、再帰的(recurrent)な結合を持ったニューラルネットワークによる時系列データの学習[Sato90]や、ボルツマンマシンによる確率分布の学習[Ackley85]も、関数の近似という点で同様な範疇に属すると考えられる。

第2の応用は、カテゴリー分けのための識別空間の作成である。これには、Hebb則[Amari78]や競合学習[Asou88]に代表される”教師なし学習”と、誤差逆伝播法[Rumelhart86]やベクトル量子化法(LVQ)[Kohonen88][McDermott91]に代表される”教師付き学習”によるものの2種類のタイプがある。

第3の応用は、ニューロン系のエネルギー最小化問題に、解きたい問題を帰着させて解を求めることである。Hopfieldによる、連想記憶[Hopfield82,84]や組合わせ最適化問題の解法[Hopfield85]、パターンマッチングにおける緩和ラベリング法[Igarashi91]、コンピュータビジョンと視覚情報処理における標準正則化理論[Poggio85]などの応用例がある。

しかし、これら3種類の応用は、”最適化”(目的関数の最小化)という共通のキーワードを持っていると見なすこともできる。第1の応用や第2の応用では、それぞれ、関数近似の近似誤差や識別率を目的関数として、”最適化”を行なっていると考えることができる。また、第3の応用でも、ある状態が適切である度合いを、ニューロン系のエネルギーを用いて定量化すれば、このエネルギーが目的関数となり、エネルギーを最小化することが”最適化”となる。目的関数の値は、ニューロン系の状態と、ニューロン間の重み係数の値によって定まるが、第

1と第2の応用では、ニューロン間の重み係数を学習により更新させることにより、目的関数の最小化をはかっている。学習の終了後に得られるのは、ニューロン系の適切な重み係数のセットである。これに対して、第3の応用では、目的関数をエネルギーの形で与える時点で、通常、重み係数の値は固定されてしまう。その条件のもとで、目的関数を最小にするニューロン系の状態を求めている。3種類の応用を”最適化”という観点から見た様子を表I.1-1にまとめた。

	機能	目的関数	応用分野、モデル、学習法etc.
第1の応用	例示による近似関数の作成	近似誤差	多層パーセプトロン+BP法、リカレントネットによる時系列データの学習、ボルツマンマシンによる確率分布の学習
第2の応用	識別空間の作成	識別率	Hebb則、競合学習、BP法、LVQ、パターン認識
第3の応用	エネルギー最小化による問題解決	エネルギー関数	連想記憶、組合わせ最適化問題、緩和ラベリング法、標準正則化理論、2層確率場モデル

表I.1-1

本論文：“ニューロン系のエネルギー最小化による最適解探索に関する研究”は、上で述べた3種類の応用の内の第3の応用に対応している。第3の応用である、ニューロン系のエネルギー最小化による問題解決方式は、新しい並列分散協調処理方式として、多くの研究者の関心を引いているが、従来のニューロコンピューティングでは、エネルギー関数が非線形関数である場合には最適解の探索に困難を生ずる場合があり、さらに、制約条件項の重み係数の設定は試行錯誤に頼っているのが実情であった。本論文で提案している”2層確率場モデル”は、重み係数などの未知パラメータを適切な値に調節しながらエネルギー最小状態をアニーリングにより求めており、エネルギー関数が非線形な場合においても適用することができる。

I.2 本論文の構成

前節I.1で述べたように、ニューラルネットワークの工学的な応用は、目的あるいは機能別に以下の3つに分けられる：(i)例示による近似関数の作成、(ii)識別空間の作成、(iii)エネルギー最小化による問題解決。これらの中で、本論文で取り扱うのは、(iii)の分野である。

まず、第II章で、組合わせ最適化問題の解法として提案されたKirkpatrickらによるシミュレーテッド・アニーリング(Simulated Annealing)を用いた方法やボルツマンマシン(Boltzmann Machine)などの確率的な動作を行なうモデルによる解法と(II.1)、その平均場近似にあたり決定論的に動作するHopfieldらのモデルについて述べる(II.2)。

次に、第III章では、このうちのHopfieldらのモデルをベースにしたモデルをパターンマッチング(ラベリング)の問題に応用する[Igarashi91]。ここでは、従来から有力な方法として提案されてきたRosenfeldの緩和ラベリング法と、Hopfieldらのモデルが、近似的に等価であることを示し(III.1)、従来は経験的に行なっていた適合係数の計算を学習により行なうことが可能なニューロモデル(ニューラル緩和ラベリング法)を提案し、それを2次元の線画マッチングの問題に適用した結果について述べる(III.2)。

この例でも示されているが、一般に組合わせ最適化問題をエネルギー最小化問題に帰着させて解く際には、エネルギー関数中に未定の係数を含んでしまうのが普通である。なぜならば、エネルギー関数は、最小化したいコストを表した項と解に関する制約条件を表した項からなるのが一般的だからである。しかし、これらの項の重みをどのような値に設定すれば良いかということは簡単ではない場合が多い。特に、エネルギー関数が非線形演算子を含んだり、1次関数や2次関数でないような複雑な場合には、Lagrangeの未定乗数法や最急降下法ではエネルギー

最小状態を求めるのは難しい。組合わせの最適化問題以外にも、一般の逆問題(既知の写像 $R:S \rightarrow I$ の下で、 I を与えて S を求める問題)はニューロン系のエネルギー最小化問題に帰着させることができる。そこで、エネルギー関数が非線形で、かつ、重み係数などの未知パラメータを含む場合に、未知パラメータを適切な値に調節しながらエネルギー最小状態を求めるという”2層確率場モデル”による方法を第IV章では提案する。この方法は、元来は視覚情報処理やコンピュータビジョンにおける逆問題の解法として考案されたが[Igarashi92,94]、一般の逆問題の解法として広い汎用性を持っている。

従来、視覚情報処理における逆問題のニューロコンピューティングによるアプローチとして、標準正則化理論、結合MRFモデル、川人-乾の視覚情報処理モデルなどがエネルギー最小化の枠組みの中で提案されてきた(IV.1,IV.2)。2層確率場モデルを用いた方法では、エネルギー関数中に非線形演算子を含むのが許され、順方向の写像(R)の導関数や逆関数を用いる必要がなく、未知パラメータの値も適切に自動調節できるという点で、これらのモデルにない長所を持っている。この2層確率場モデルの一般論をIV.3で述べる。

また、組合わせ最適化問題も、制約条件を与えてそれを満足する状態を求めるという一種の逆問題と見なすこともできるので、この2層確率場モデルを用いて解くことができる(IV.4)[Igarashi92-2]。この第IV章で、2層確率場モデルの理論的な基礎が一般的な形で与えられており、第IV章は本論文の中核となる章である。

第V章では、2層確率場モデルの検証と実際の問題への応用をかねて、画像処理の分野では、エッジ情報を用いた画像修復の問題(V.1)[Igarashi92,94]と、コーナーなどの特徴点の情報を用いたエッジ修復の問題(V.2)を取り上げ[Igarashi93-2]、組合わせ最適化問題の分野では、巡回セールスマン問題(V.3)を取り上げた[Igarashi92-2]。巡回セールスマン問題では、さらに、2層確率場モデルに平均場近似を施すことも試みた(V.4)[Igarashi93]。画像修復の問題と平均場近似を用いた巡回セールスマン問題の解法においては、ニューロンの動作などの処理を並列化すること

により、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)を用いることが可能となった。これらの応用問題における実験を通して、パラメータ更新ルールの正当性が検証され、逆問題の解法と最適解の探索に2層確率場モデルがきわめて有効であることが実証できた。

さらに、上記以外の問題への応用として、両眼立体視における奥行き知覚の計算モデルとしての可能性(V.5.1)と、巡回セールスマン問題よりはるかに複雑である配送問題への応用を検討した(V.5.2)。前者の問題への応用を検討することは、脳における視覚情報処理の計算モデルとしての2層確率場モデルの可能性を探るものである。後者の問題は、多目的最適化問題の一例として、きわめて現実的で実用性の高い例題である。2層確率場モデルの実社会におけるインパクトのある応用が可能であるかを検討している。

第VI章には、本論文のまとめと今後の研究の展開について所感を述べた。また、本論文で引用した文献のリストと、式の導出などの付録を最後に付記した。

第II章 最適解探索のためのニューラルネットワークモデル

II.1 確率的モデルとシミュレーテッド・アニーリング

ニューロコンピューティングによる組合わせ最適化問題の解法としては、Kirkpatrick-Gelatt-Vecchi らの提案したシミュレーテッド・アニーリングによる方法が最も代表的な方法として挙げられる[Kirkpatrick83,84]。彼らは、コンピュータのLSI回路の最適な配置を求める問題や、巡回セールスマン問題(Traveling Salesman Problem)を、統計物理学におけるスピン系のエネルギー最小状態を求める問題に帰着させ、さらに、シミュレーテッド・アニーリング(Simulated Annealing)と呼ばれる方法で、最終的にシステムをエネルギーが最小な状態に収束させることを提案した。彼らは、熱平衡状態に向けての状態遷移則としてメトロポリス法を用いたが、その代わりにヒート・バス法を用いたボルツマン・マシン[Ackley85]、それをさらに多値ニューロンに拡張したギブス・サンプラー[Geman84]などが提案され、組み合わせ最適化問題のみならず、学習や画像処理等の問題にも応用されている。

Kirkpatrick-Gelatt-Vecchi らの提案したシミュレーテッド・アニーリング法を、巡回セールスマン問題 の場合について説明する。まず、巡回セールスマン問題とは、

【巡回セールスマン問題】

” 与えられた都市配置に対して、すべての都市をただ一度だけ訪問する巡回回路のうちで、最も経路長が短いものを求めよ”

という組合わせ最適化問題である。この問題は、入力データの長さ(ここでは都市数)の多項式オーダーの計算時間で厳密解を求めるのは不可能であることが知られ

ている[Ibaraki92]。ここでは、巡回路を都市名の1次元リストで表す。例えば、都市A,B,C,...(都市数N)を $X_1, X_2, X_3, \dots, X_N$ ($X_i \in \{A, B, C, \dots\}$)の順に訪問することを、 $x=(X_1, X_2, X_3, \dots, X_N)$ で表すことにする。可能なリストの集合をSで表す。xがシステムの状態を表し、このとき得られる巡回路の経路長を、システムのエネルギーE(x)と定義する。確率分布が温度Tを持つGibbs分布(Boltzmann分布)で与えられる熱平衡状態にシステムはあるとする。この温度Tをアニーリングスケジュール $\{T_i\}$ ($i=0, 1, \dots, m$)に沿って下げていく。メトロポリス法を用いたシミュレーテッド・アニーリング法は、以下の処理フローにまとめることができる。

【メトロポリス法を用いたシミュレーテッド・アニーリング法】

- (i) システムの状態xと、システムの温度Tの初期状態を選ぶ($T=T_0$)。
- (ii) 状態xを試行変形させて状態x'を選ぶ。
- (iii) if $\Delta E = E(x') - E(x) < 0$ then 状態x'に遷移させる。
 else $\exp(-\Delta E/T)$ の確率で、状態x'に遷移させる。
- (iv) ステップ(ii)と(iii)をシステムが熱平衡状態に達するまで十分繰り返す。
- (v) if $i=m$ then 処理終了。
 else 温度Tを1段階下げて(i.e. $i \rightarrow i+1, T=T_i$)、ステップ(ii)へ戻る。

上記、ステップ(ii)においての試行変形の選び方には、いろいろな方式があるが、巡回路xを構成する都市同士を結ぶ枝(リンク)から、 λ 本の枝をランダムに選んで付け換えるという変形法が代表的である。この操作は、巡回路の交差を取り除く効果があり、最短経路長を持った巡回路を求める目的に適していると考えられている。Kirkpatrickらの方法では、 $\lambda=2, 3$ の場合が考えられている。 λ 本の枝を付け換えて得られる状態は、元の状態の λ 近傍と呼ばれているが[Nishikawa82]、一般に、現在の状態の近傍を重点的に探索を行なうという方略が採用されている。メトロポリス法を用いたシミュレーテッド・アニーリング法の一般的な原理[Uesaka

90]を、付録Aに記した。

Kirkpatrickらは、熱平衡状態に向けての状態遷移則としてメトロポリス法(ステップ(ii)と(iii))を用いたが、その代わりにヒート・バス法(熱浴法)を用いたボルツマン・マシン[Ackley85]、それをさらに多値ニューロンに拡張したギブス・サンプラー[Geman84]などが提案され、組み合わせ最適化問題のみならず、学習や画像処理等の問題にも応用されている。

ヒート・バス法の状態遷移則を簡単に述べると[Rumelhart86]、ボルツマン・マシンでは、0または1の離散値をとるニューロン(物理でのIsingスピンに対応する) s_i の集合からなる体系を考える。このときの体系のエネルギー関数は、対称な結合重み w_{ij} と、閾値 θ_i を用いて、

$$E = -\sum_{i < j} w_{ij} s_i s_j + \sum_i \theta_i s_i \quad (\text{II.1-1})$$

と表されているとする。このとき体系内の各ニューロン s_k を

$$P(s_k = 1) = \frac{1}{1 + e^{-\Delta E_k / T}} \quad (\text{II.1-2})$$

の確率で発火させる。ただし、

$$\Delta E_k \equiv \sum_i w_{ki} s_i - \theta_k \quad (\text{II.1-3})$$

である。(II.1-3)の右辺は、 k 番目のニューロン素子に入力される総入力と解釈され、他のニューロンからの出力信号の重み付き線形和 $\sum_i w_{ki} s_i$ と閾値 θ_k とで表されている。(II.1-2)を書き直すと、

$$P(s_k = 1) = \frac{e^{-E(s_k=1)/T}}{e^{-E(s_k=1)/T} + e^{-E(s_k=0)/T}} \quad (\text{II.1-4})$$

となる。ただし、 $E(s_k=1)$ は、 s_k 以外のニューロンの状態は変化させずに $s_k=1$ としたときの体系のエネルギーである。この状態遷移方法は、統計物理学で用いられるヒート・バス法(熱浴法)と同一である。Geman-Gemanの提案しているギブス・サン

プラー[Geman84]は、(II.1-4)の多値ニューロンへの拡張となっている。かれらの応用例では、濃淡画像の画像強度と、画像強度の不連続性を表す線過程(line process)と呼ばれる2種類のニューロンがエネルギー的に結合した体系を考えており、エネルギー関数も(II.1-1)のような単純な2次式ではない。

シミュレーテッド・アニーリング法では、温度 T を下げていくスピード $T(t)$ が問題となるが、Gemanらのギブス・サンプラー[Geman84]では、次の定理が証明されている。

【定理II.1-1】

離散変数(ニューロン)の総数を N とし、 $n_i (1 \leq n_i \leq N)$ を時刻 $t-1 (t=1,2,\dots)$ に状態を更新する対象として選択された離散変数とする。更新後の体系の状態を $X(t)$ とする。また、 S_0 を、エネルギー E が最小値を与える状態の集合とし、 q_0 を S_0 上の一様分布(i.e. E の最適分布、付録Aの(A-1))とする。

さらに、ある $\tau > N$ が存在して、任意の $t (=0,1,2,\dots)$ について、 $\{n_{t+1}, \dots, n_{t+\tau}\}$ が1から N までの全ての番号を一度以上含むと仮定する。

もし、 $T(t)$ が単調減少関数で、かつ、

$$a) T(t) \rightarrow 0 \text{ as } t \rightarrow \infty$$

$$b) T(t) \geq ND / \log(t) \text{ for all } t \geq t_0 \text{ for some integer } t_0 \geq 2.$$

であれば、任意の状態 α の分布は初期状態 η によらずに最適分布で与えられる。すなわち、

$$\lim_{t \rightarrow \infty} P(X(t) = \alpha | X(0) = \eta) = q_0(\alpha) \quad (\text{II.1-5})$$

が成り立つ。ただし、b)の D は、 E の最小値 E_* と最大値 E^* の差 $D = E^* - E_*$ を表している。

II.2 決定論的モデルと平均場アニーリング

前節で述べたGemanらの定理[Geman84]では、厳密なエネルギー最小状態に体系が収束するためには、 $1/\log(t)$ のオーダーで温度をゆっくり下げる必要がある。しかし、これは現実的であるとは言い難い。なぜならば、温度 T に到達するには、それまでの状態遷移回数 $t(\geq t_0)$ は、 $t \geq \exp(ND/T)$ である必要があるため、ニューロン数が増えるとその指数オーダーで必要な状態更新回数が増大してしまうからである。

また、シミュレーテッド・アニーリング法の原理(付録.A)では、熱平衡状態(定常状態)の実現を前提としているが、熱平衡状態の到達に必要な更新回数はニューロン数や温度が下がるにつれて増大し、あらかじめ定めた適当な有限回数で状態更新を打ち切ってしまうのが現状である。状態の更新回数が少ないと高品質の解が得られないことが多い。

従って、前節で述べた、確率的に動作するニューロモデルを用いてシミュレーテッド・アニーリング法によりエネルギー最小状態を求めることは、計算時間の点で難がある。特に、Hopfield-Tankが、巡回セールスマン問題の解法に提案したニューロモデル[Hopfield85](以下では、Hopfield-Tankモデルと称する)では、Kirkpatrickら[Kirkpatrick83,84]の1次元リストで巡回路を表現する方法と異なり、2次元の行列($N \times N$, N ;都市数)で解を表現する。このようにニューロン数が多い場合には、確率的な動作を行なうモデルを用いてシミュレーテッド・アニーリング法を適用するのは得策ではない。しかし、Hopfieldらの解法では、エネルギー関数は、最小にしたい経路の長さを表すコスト項と、可能解(または実行可能解, feasible solution; 制約条件をすべて満足している解)であることを要請する制約条件項とから成り立っており、組合わせ最適化問題の解法としては一般性がある。Kirkpatrickらの1次元リストによる巡回路の表現は、巡回セールスマン問題におい

では、可能解だけをすべてもれなく尽くしてはいるが、任意の組み合わせ最適化問題において可能解だけをもれなく生成できる表現を期待することはできない。

本節では、決定論的な動作を行なうニューロンモデルの代表であるHopfield-Tankモデルを、平均場近似と統計物理学の観点から見た解釈を一般的な形でまとめておく。ここでは一般的に多値ニューロン系($s_i = \{0, 1, \dots, n-1\}$, $i=1, \dots, N$)を考える。体系のエネルギー関数 E を次の2次式で定義する。

$$E = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{ij} s_i s_j + \sum_{i=1}^N \theta_i s_i \quad (\text{II.2-1})$$

また、体系の自由エネルギー F と、エントロピー S を次のように定義する。

$$F \equiv \langle E \rangle - TS \quad (\text{II.2-2})$$

$$S \equiv - \sum_{\{s_i\}} P(\{s_i\}) \log P(\{s_i\}) \quad (\text{II.2-3})$$

ここで、 $\langle E \rangle$ は、系のエネルギー E の統計平均値であり、状態 $\{s_i\}$ ($i=1, \dots, N$)が出現する確率 $P(\{s_i\})$ を用いて、

$$\langle E \rangle \equiv \sum_{i=1}^N \sum_{s_i=0}^{n-1} P(\{s_i\}) E(\{s_i\}) \quad (\text{II.2-4})$$

で定義される。系が熱平衡状態にあれば、(II.2-4)は時間平均値と等価である。ここで各ニューロン同士の統計的な相関を無視して

$$P(\{s_i\}) \approx \prod_{i=1}^N P(s_i) \quad (\text{II.2-5})$$

という近似を行なう(平均場近似)と、 $\langle E \rangle$ とエントロピー S は

$$\langle E \rangle \approx E_{mf} \equiv -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N w_{ij} \left[\sum_{s_i=0}^{n-1} s_i P(s_i) \right] \left[\sum_{s_j=0}^{n-1} s_j P(s_j) \right] + \sum_{i=1}^N \theta_i \left[\sum_{s_i=0}^{n-1} s_i P(s_i) \right] \quad (\text{II.2-6})$$

$$S \approx S_{mf} \equiv - \sum_{i=1}^N \left[\sum_{s_i=0}^{n-1} P(s_i) \log P(s_i) \right] \quad (\text{II.2-7})$$

と表される。ただし、(II.2-5)の $P(s_i)$ は*i*番目のニューロンが状態 s_i をとる確率であり、(II.2-6),(II.2-7)における独立変数は $(n-1) \times N$ 個の $P(s_i)(s_i > 0)$ とする。 N 個の $P(s_i=0)$ ($i=1, \dots, N$) の値は、 $\sum P(s_i)=1 (i=1, \dots, N)$ から計算できる。系の自由エネルギー F は、これらの E_{mf} と S_{mf} とを用いて、

$$F \approx F_{mf} \equiv E_{mf} - TS_{mf} \quad (\text{II.2-8})$$

で近似される。ここでニューロンの内部状態(膜電位に相当) $u(s_i)$ ($(n-1) \times N$ 個, $s_i > 0$) を次のように定義する。

$$u(s_i) \equiv -T \partial S / \partial P(s_i) \quad (\text{II.2-9})$$

(II.2-7)の近似式を(II.2-9)へ代入すると、

$$u(s_i) \approx T \log \left[\frac{P(s_i)}{1 - \sum_{s_i > 0} P(s_i)} \right] \quad (\text{II.2-10})$$

を得る。(II.2-10)を $P(s_i)(s_i > 0)$ について解いてやると、ニューロンの出力状態 $P(s_i)$ と内部状態 $u(s_i)$ の入出力関係は(一般化された)sigmoid関数、

$$P(s_i) = \frac{e^{u(s_i)/T}}{1 + \sum_{s_i > 0} e^{u(s_i)/T}} \quad (\text{II.2-11})$$

で与えられる。このとき、(II.2-8)の自由エネルギー F_{mf} の極小状態は次の繰り返し計算により決定論的に求めることができる。

$$\tau \frac{du(s_i)}{dt} = -\frac{\partial F_{mf}}{\partial P(s_i)} = -\frac{\partial E_{mf}}{\partial P(s_i)} + T \frac{\partial S_{mf}}{\partial P(s_i)} \quad (\text{II.2-12})$$

$$= -u(s_i) - \frac{\partial E_{mf}}{\partial P(s_i)} \quad (\text{II.2-13})$$

従って、(II.2-11)と(II.2-13)によりニューロンを動作させることにより、温度 T における自由エネルギーの極小状態が(平均場近似の範囲で)求められる。また、

(II.2-11)より、温度 T が sigmoid 関数の傾きに相当しており、 $T \rightarrow 0$ で、 $u(s_i)$ の符号により、 $p(s_i)$ は0または1のいずれかに近づいて行くことがわかる。また、(II.2-8)の関係から温度 T を徐々に下げていくことにより、(II.2-11), (II.2-13)の解は、平均場近似の範囲内で、エネルギー関数 E の極小状態に近づいて行くと期待される（平均場近似アニーリングMean Field Annealing, または決定論的アニーリングDeterministic Annealing）。上のモデルにおいて、2値ニューロン($n=2$)の場合がHopfield-Tankモデル[Hopfield85]に相当する。2値ニューロン($n=2$)の場合には、 $dF_{mf}/dt \leq 0$ が成立していることを容易に示すことができ、(II.2-11), (II.2-13)の繰り返し計算による自由エネルギーの極小状態への収束性が、最急降下的ではないが保証されている。

しかし、このモデルでは、多値ニューロンの場合には、独立変数の個数が $(n-1) \times N$ 個と多くなってしまふという欠点がある。そこで、多値ニューロンの場合には、

$$\langle s_i \rangle \approx \frac{\sum_{s_i=0}^{n-1} s_i e^{-E_{mf}/T}}{\sum_{s_i=0}^{n-1} e^{-E_{mf}/T}} \quad (\text{II.2-18})$$

を N 個の未知数 $\langle s_i \rangle (= \sum_{s_i=0, \dots, n-1} s_i P(s_i))$ について、繰り返し計算により解いた方がよいと考えられる。この点については、V.1.6であらためて検討する。

第III章 ニューラルネットワークモデル のパターンマッチングへの応用

III.1 緩和ラベリング法とHopfield-Tankモデル

前章では、Hopfield-Tankらのアナログニューロンモデルが、平均場近似を用いて自由エネルギーの極小状態を求めていることを述べた。本節では、パターンマッチングの代表的な手法と知られているRosenfeldの緩和ラベリング法が、Hopfield-Tankモデルから近似を用いて導出できることを示す。

一般に、画像理解やパターン認識では入力画像や入力パターンから画像やパターンの特徴（線、交点、領域など）を抽出してそれらの構造を記述する”セグメンテーション”と、抽出された特徴と認識対象のモデルとを照合することによりパターンの認識や画像の表す世界の記述を作成するという”マッチング”の2つの処理過程からなる[Matsuyama89]。しかし、画像信号のレベルだけから完全な”セグメンテーション”を得ることは難しく、抽出される特徴には変形が加わっているのが普通である。従って、次段階での”マッチング”においては、こうした変形を吸収できるマッチング方式が必要となってくる。緩和ラベリング法 (relaxation labeling method)はこの目的のための一手法である。緩和ラベリング法は、元々は線画解釈の際に生ずるラベル付け問題を解くための並列アルゴリズムとして Rosenfeld-Hummel-Zuckerらにより提案された[Rosenfeld76]。以下では入力パターンのマッチングの基本単位(Primitive)を”対象物(Object)”と称し、モデルのマッチングの基本単位(Primitive)を”ラベル(Label)”と称する。

Rosenfeldらの論文[Rosenfeld76]では各対象物に割り当てられたラベルの重みを、周囲との整合性を保ちながら更新するためのルールが2種類（線形確率モデル、非線形確率モデル）提案されている。その後も様々な更新ルールが提案された

[Zucker81][Ejima85]が、これらの更新ルールの適用により、局所的なつじつま合わせを繰り返しながら整合度の高い解を発見して行くのが緩和ラベリング法の基本的な考えとされてきた。しかし、緩和ラベリング法を、ある評価関数の極小値（又は極大値）を求めるための一手法と解釈し、更新ルールとして最急降下法（又は山登り法）を用いる方法が考案された。評価関数としては、ラベル付けの整合性(consistency) [Faugeras81][Hummel83]、決定の曖昧さ(ambiguity 又は entropy) [Faugeras81]、パターン間の不一致度[Ogawa87]などの量が用いられている。さらに、Rosenfeldらの非線形確率モデルで用いられている更新ルールは、多項式関数の極大値を探索するために Baum により提案された growth operator と同一であることが指摘された[Ejima88]。従って、緩和ラベリング法は、ある評価関数の極小値（又は極大値）探索のための並列アルゴリズムの一手法であるといえる。Rosenfeldらの線形確率モデル、非線形確率モデルを以下に示す。

【Rosenfeld-Hummel-Zucker の線形確率モデル】

対象物 a_i ($i=1, \dots, n$)にラベル λ_l ($l=1, \dots, m$)を割り当てる重みを $p_{i,l}$ ($0 \leq p_{i,l} \leq 1$)とし、 $p_{ij}(l,s)$ を、対象物 a_j にラベル λ_s が割り当てられたときに対象物 a_i にラベル λ_l が割り当てられる条件付き確率とすると、 $p_{i,l}$ の値を次のルールにより更新する ($k=0, 1, \dots$):

$$p_{i,l}^{(k+1)} = \sum_{j=1}^n c_{ij} \left[\sum_{s=1}^m p_{ij}(l,s) p_{j,s}^{(k)} \right]. \quad (\text{III.1-1})$$

ただし、

$$\sum_{s=1}^m p_{ij}(l,s) = 1 \quad \text{for all } i, j, \text{ and } l \quad (\text{III.1-2})$$

で、 c_{ij} は適当な定数で $\sum_j c_{ij} = 1$ を満たすものとする。[END]

【Rosenfeld-Hummel-Zucker の非線形確率モデル】

線形確率モデルで用いた条件付き確率 $p_{ij}(l,s)$ の代わりに、correlation

$$r_{ij}(l,s) \equiv \frac{P(A \& B) - P(A)P(B)}{\sqrt{\{P(A) - P^2(A)\}\{P(B) - P^2(B)\}}} \quad (\text{III.1-3})$$

[A: 対象物 a_i にラベル λ_l を割り当てる事象、B: 対象物 a_j にラベル λ_s を割り当てる事象、 $-1 \leq r_{ij}(l,s) \leq 1$]

を用いて、次のルールにより $p_{i,l}$ の値を更新する($k=0,1,\dots$):

$$p_{i,l}^{(k+1)} = \frac{p_{i,l}^{(k)} [1 + q_{i,l}^{(k)}]}{\sum_{l=1}^m p_{i,l}^{(k)} [1 + q_{i,l}^{(k)}]} \quad (\text{III.1-4})$$

ただし、

$$q_{i,l}^{(k)} \equiv \sum_{j=1}^n d_{ij} \left[\sum_{s=1}^m r_{ij}(l,s) p_{j,s}^{(k)} \right] \quad (\text{III.1-5})$$

であり、 d_{ij} は適当な定数で $\sum_j d_{ij} = 1$ を満たすものとする。[END]

ここで、 $1 + q_{i,l}^{(k)} = Q_{i,l}^{(k)}$ と置き換えると、(III.1-4)は、

$$p_{i,l}^{(k+1)} = \frac{p_{i,l}^{(k)} Q_{i,l}^{(k)}}{\sum_{l=1}^m p_{i,l}^{(k)} Q_{i,l}^{(k)}} \quad (\text{III.1-4'})$$

$$[Q_{i,l}^{(k)} \geq 0]$$

と表されるが、 $Q_{i,l}^{(k)}$ としては(III.1-5)以外にも種々の形式のものが提案されている

[Zucker81]。

そこで、体系の自由エネルギーFが

$$F(\{p_{i,l}\}) \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^m \frac{1}{\tau_{i,l}} p_{i,l}^2 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^m Q_{i,l} p_{i,l} \quad (\text{III.1-6})$$

$$Q_{i,l} \equiv \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \sum_{s=1}^m r'_{ij}(l,s) p_{j,s} \quad (\text{III.1-7})$$

で近似されているニューロン系を考える(温度Tは固定しておく)。第1項は、ニューロンの値が発散しないための減衰項であり、第2項の $Q_{i,l}$ はニューロン $p_{i,l}$ が周囲から感ずる有効場を表していると解釈できる。 $r'_{ij}(l,s)$ は(III.1-3)のcorrelationに相当し、一般には適合係数(compatibility coefficients)と呼ばれている。(III.1-6)を仮定することは、Hopfield-Tankモデル(II.2)において、エントロピー(II.2-7)の項を考慮しないで、線形の入出力関数を仮定することに対応している。線形化されたHopfield-Tankモデルでは、(II.2-12)より、自由エネルギーFの極小状態を次の状態遷移で求めることになる。

$$\frac{dp_{i,l}}{dt} = -\frac{\partial F}{\partial p_{i,l}} \quad (\text{III.1-8})$$

$$= -\frac{1}{\tau_{i,l}} p_{i,l} + \frac{1}{2} Q_{i,l} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{s=1}^m \frac{\partial Q_{j,s}}{\partial p_{i,l}} p_{j,s} \quad (\text{III.1-9})$$

ここで、以下のような離散時間近似を行なう。ただし、時間幅 $\Delta t_{i,l}$ は各ニューロンごとに異なるとする。

$$\frac{dp_{i,l}}{dt} \approx \frac{p_{i,l}(t + \Delta t_{i,l}) - p_{i,l}(t)}{\Delta t_{i,l}} \quad (\text{III.1-10})$$

ここまでは、減衰項の時定数 $\tau_{i,l}$ を定数と仮定してきたが、時間幅 $\Delta t_{i,l}$ とともに、ニューロンの値 $p_{i,l}(t)$ に比例する量と考え、比例定数を $d_{i,l}$ として、

$$\Delta t_{i,l} = \tau_{i,l} = d_{i,l} p_{i,l}(t) \quad (\text{III.1-11})$$

とおくと、(III.1-9)は次のように近似される。ただし、 $p'_{i,l}$ は1ステップ(時間幅 Δ

$t_{i,l}$ だけ更新した後の $p_{i,l}$ の値を表している。

$$p'_{i,l} = \frac{1}{2} d_{i,l} p_{i,l} \left[Q_{i,l} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \sum_{s=1}^m \frac{\partial Q_{j,s}}{\partial p_{i,l}} p_{j,s} \right] \quad (\text{III.1-12})$$

$Q_{i,l}$ が(III.1-7)のように表されていれば、

$$\sum_{j=1}^n \sum_{s=1}^m \frac{\partial Q_{j,s}}{\partial p_{i,l}} p_{j,s} = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \sum_{s=1}^m r'_{ji}(s,l) p_{j,s} \quad (\text{III.1-13})$$

となる。(III.1-13)を(III.1-12)の右辺に代入し、さらに、 $r'_{ji}(s,l) = r'_{ij}(l,s)$ であれば、

$$p'_{i,l} = d_{i,l} Q_{i,l} p_{i,l} \quad (\text{III.1-14})$$

ここで、比例定数 $d_{i,l}$ は添字 i だけに依存すると仮定し、 $\sum_s p'_{i,s} = 1 (i=1, \dots, n)$ であることに注意すると、

$$d_{i,l} = 1 / \left[\sum_{s=1}^m Q_{i,s} p_{i,s} \right] \quad (\text{III.1-15})$$

と $d_{i,l}$ の値を毎回設定してやれば、

$$p'_{i,l} = \frac{Q_{i,l} p_{i,l}}{\sum_{s=1}^m Q_{i,s} p_{i,s}} \quad (\text{III.1-16})$$

という状態更新則が得られる。(III.1-16)は、(III.1-4')と同一の形式を持ち、

Rosenfeld-Hummel-Zucker の非線形確率モデルと同じタイプの状態更新則である。

また、(III.1-11)のかわりに

$$\Delta t_{i,l} = \tau_{i,l} = d'_i \quad (\text{III.1-17})$$

と仮定すると、上と同様な議論により

$$p'_{i,l} = \frac{Q_{i,l}}{\sum_{s=1}^m Q_{i,s}} \quad (\text{III.1-18})$$

が導かれる。ここで、(III.1-7)の $r'_{ij}(l,s)$ が条件付き確率 $p_{ij}(l,s)$ であれば、Rosenfeld-Hummel-Zuckerの線形確率モデル(III.1-1)と同じタイプの状態更新則を得ることができる。

従って、入出力関数を線形化したHopfield-Tankモデルに(III.1-11)や(III.1-17)などの特殊な離散時間近似を行ない、適合係数が $r'_{ij}(s,l)=r'_{ij}(l,s)$ であれば、Rosenfeld-Hummel-Zuckerの線形確率モデルや非線形モデルを導出できることがわかった。しかし、(III.1-11)や(III.1-17)などの様に、時定数がニューロンの状態、したがって時間に依存してしまうという近似では、(III.1-8)により自由エネルギーの極小状態に体系が収束するという保証がない。また、線形モデルでは、ニューロンの状態 $p_{i,l}$ が確率という意味を持つためには、適合係数が非負という制限が必要となる。本来、Hopfield-Tankモデルではニューロンの出力状態が0から1の実数値をとることは、入出力関数としてsigmoid関数を用いることにより実現されていた。こうした点からも、線形化されたHopfield-Tankモデル, i.e., Rosenfeld-Hummel-Zuckerの緩和ラベリング法は、ニューロモデルの観点から見るとやや不自然さが目についている。そこで、次節では、ニューラルネットワークモデルとして無理のないモデル(ニューラル緩和ラベリング法)を提案する。

III.2 ニューラル緩和ラベリング法の提案

- 線画マッチングへの応用 -

Hopfield-Tank のアナログニューロンモデル[Hopfield85]やボルツマンマシン[Ackley85]等のニューラルネットワークモデルを用いた最適化問題の解法は、ユニット間で相互作用を行う多体系のエネルギー関数の極小値や最小値を求めるという点で緩和ラベリング法と類似した手法であるといえる。前節で述べたように、入出力関数が線形のHopfield-Tank型のアナログニューロンモデルの状態遷移則に、状態に依存する特殊な離散時間近似を行うと、Rosenfeld型の緩和ラベリング法[Rosenfeld76]で用いられている2種類の更新ルールと同一タイプの遷移則が得られる。しかし、この離散時間近似ではニューロンの状態に応じて時定数を変更する必要があり、また、入出力関数も線形であり、ニューラルネットワークモデルとしてはかなり無理がある。そこで、決定論的なニューラルネットワークモデルとして無理がなく、さらに、パターンマッチングの学習能力も備えたモデルを用いた緩和ラベリング法("ニューラル緩和ラベリング法")をIII.2.1で提案する。

また、"ニューラル緩和ラベリング法"では、従来の緩和ラベリング法では経験的にしか与えることができなかった適合係数の計算に必要なパラメータの値を、学習することが可能である。この学習効果を確認するために、III.2.3では、直線線分から構成される図形のマッチングと認識を例に取り、従来法の代表例であるRosenfeld型の緩和ラベリング法とニューラル緩和ラベリング法との性能を、実験により比較した。

III.2.1 ニューラル緩和ラベリング法

次の2つの層(p層、q層)からなるニューラルネットワークモデルを考える(図 III.2.1-1)。各層は、対象物のn個のユニットに対するm個のラベル(NILラベルを含む)のラベル付けに対応する $n \times m$ 個のアナログニューロン $\{\phi_{i,j}^a\}$ ($i=1, \dots,$

$n, l=1, \dots, m, \alpha=p, q$ から構成される。p層のニューロン $\phi_{i,l}^p$ とq層のニューロン $\phi_{i,l}^q$ の出力値を、それぞれ $p_{i,l}$ と $q_{i,l}$ ($0 \leq p_{i,l} \leq 1, 0 \leq q_{i,l} \leq 1$) とし、内部状態を、それぞれ、 $U_{i,l}$ と $Q_{i,l}$ とする。 $p_{i,l}$ は、対象物のユニット a_l にモデルのラベル λ_l を割り当てる重みを表現しており、 $Q_{i,l}$ はp層のニューロン $\phi_{i,l}^p$ の感ずる有効場であり、周囲のラベル付けからの"支持量"(support)[Hummel83]を表している。この $Q_{i,l}$ を $[0,1]$ 内の実数に正規化したものが $q_{i,l}$ であり、 $q_{i,l}$ の値は周囲のラベル付けからの $p_{i,l}$ に対する予測値と見なす。

また、マッチングの進んでいる度合を表す評価関数として局所的なつじつま合わせ(整合性)の総計を採用する。すなわち、体系のエネルギー関数を、

$$E = \frac{1}{2} \sum_i \sum_\ell (p_{i,\ell} - q_{i,\ell})^2 \quad (\text{III.2.1-1})$$

で定義する。p層内のニューロン $\phi_{i,l}^p$ の内部状態 $U_{i,l}$ と出力値 $p_{i,l}$ の時間変化は

$$\frac{dU_{i,\ell}}{dt} = -\frac{\partial E}{\partial p_{i,\ell}} \quad (\text{III.2.1-2})$$

$$= -(p_{i,\ell} - q_{i,\ell}) + \sum_{j \neq i} \sum_s (p_{j,s} - q_{j,s}) \frac{\partial q_{j,s}}{\partial p_{i,\ell}} \quad (\text{III.2.1-3})$$

$$p_{i,\ell} = g(U_{i,\ell}; x_1, h_1) \quad (\text{III.2.1-4})$$

で与えられる。(III.2.1-4)の関数 g は、sigmoid関数で

$$g(x; x_0, h_0) \equiv [\tanh\{(x - h_0)/x_0\} + 1]/2 \quad (\text{III.2.1-5})$$

で定義される。q層内のニューロン $\phi_{i,l}^q$ の内部状態 $Q_{i,l}$ と、出力値 $q_{i,l}$ は次のように計算する。

$$Q_{i,\ell} = \sum_{j \neq i} \sum_s r_{ij}(\ell, s) p_{j,s} + e_{i,\ell} \quad (\text{III.2.1-6})$$

$$q_{i,\ell} = g(Q_{i,\ell}; x_2, h^{(i)}) \quad (\text{III.2.1-7})$$

ここで、 $e_{i,l}$ は、ユニット a_l にラベル λ_l を割り当てる妥当性を表している。

(III.2.1-2)からわかるように、ここでは(II.2-7)のようなエントロピー項を考えていない。ここでは、 $q_{i,l}$ を $p_{i,l}$ に対する予測値という意味を持たせているので、すべての (i,l) に対して $p_{i,l}=q_{i,l}$ が成り立つことを収束条件としたいと考えている。もし、(II.2-12)で示したエントロピー項を(III.2.1-2)で考えると、必ずしも $p_{i,l}=q_{i,l}$ の状態に収束するとは限らない。

(III.2.1-4)と(III.2.1-7)の定義では、 $0 \leq p_{i,l} \leq 1$ 、 $0 \leq q_{i,l} \leq 1$ であることだけを要請しており、RosenfeldらのFuzzyモデルに相当している[Rosenfeld76]。また、適合係数 $r_{ij}(l,s)$ の値としては任意の実数をとることが許され、sigmoid関数中のパラメータ x_1, x_2 を0に近づけると、 $p_{i,l}$ と $q_{i,l}$ の値が0または1の離散的緩和ラベリング法が実現できる。

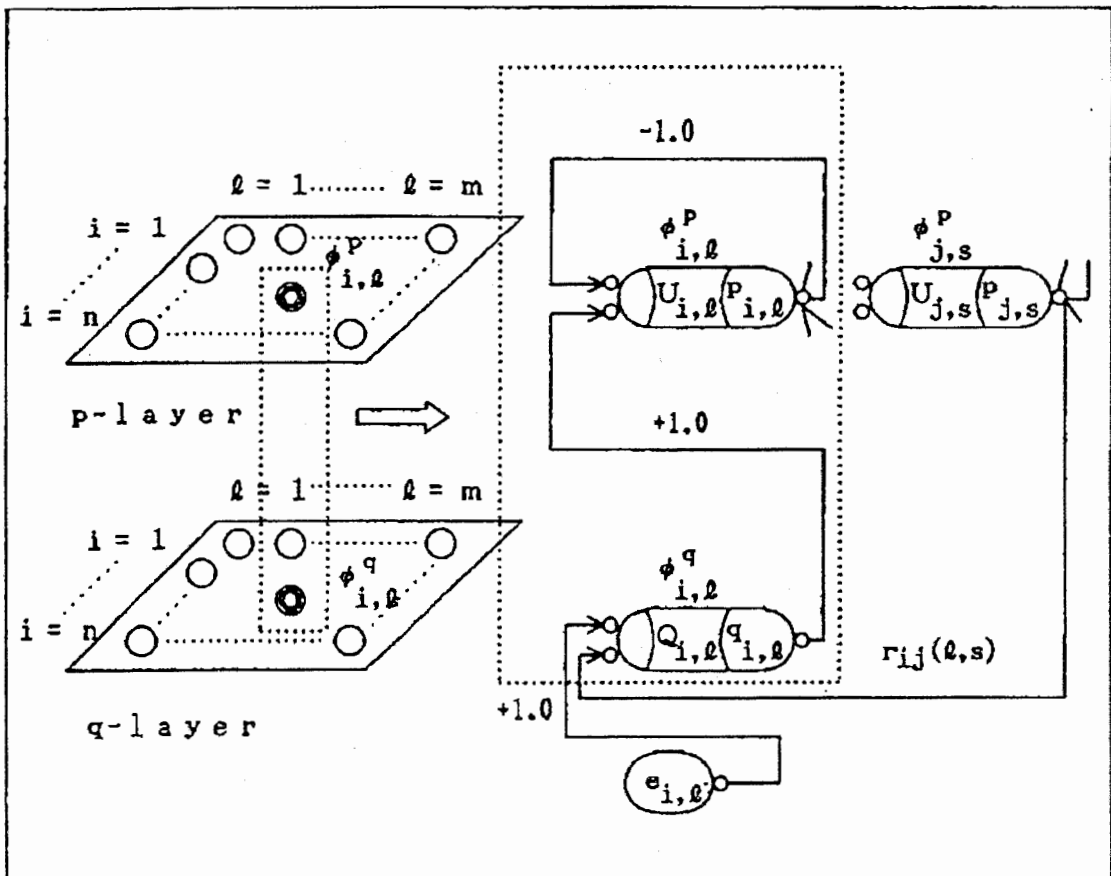


図 III.2.1-1 ニューラル緩和ラベリング法で用いられるニューラルネットワークモデル。

ただし、(III.2.1-3)の第2項の相互作用は省いてある。

すべてのニューロンが状態遷移を一回ずつ行うことを状態更新の1ステップとする。対象物の1つのユニットに複数のラベルが割り当てられるのを防ぐために、1ステップの状態更新が終了するごとに次の処理を行う。各*i*ごとに $\{q_{i,l}\}$ ($l=1, \dots, m$)を値の大きい順に並べ、それを $\{q_i^{(1)}, q_i^{(2)}, \dots, q_i^{(m)}\}$ で表す。(III.2.1-7)の sigmoid関数の中心軸の位置を表すパラメータ*h*を、各*i*ごとに $h^{(i)} = (Q_i^{(1)} + Q_i^{(2)}) / 2$ と変更する。この処理より、 $q_i^{(1)}$ と $q_i^{(2)}$ との値の差は増大し、局所的に支持量の最も大きいラベル付けが他のラベル付けよりも優遇されることになる。ニューロン同士の競争を抑制的な相互作用を用いずに行なっていると見なすことができる。

上で述べたニューラル緩和ラベリング法の応用として、直線線分から構成される図形（線画）のマッチングと図形認識への応用を考えた。今回は、図III.2.1-2に示す5個の標準パターン $\{D_N\}$ ($N=1, \dots, 5$)を考えた。図中には、線分を識別するための番号と向きが示されているが、本方式によるマッチングと認識の結果は番号の付け方や線分の向きには依存しない。

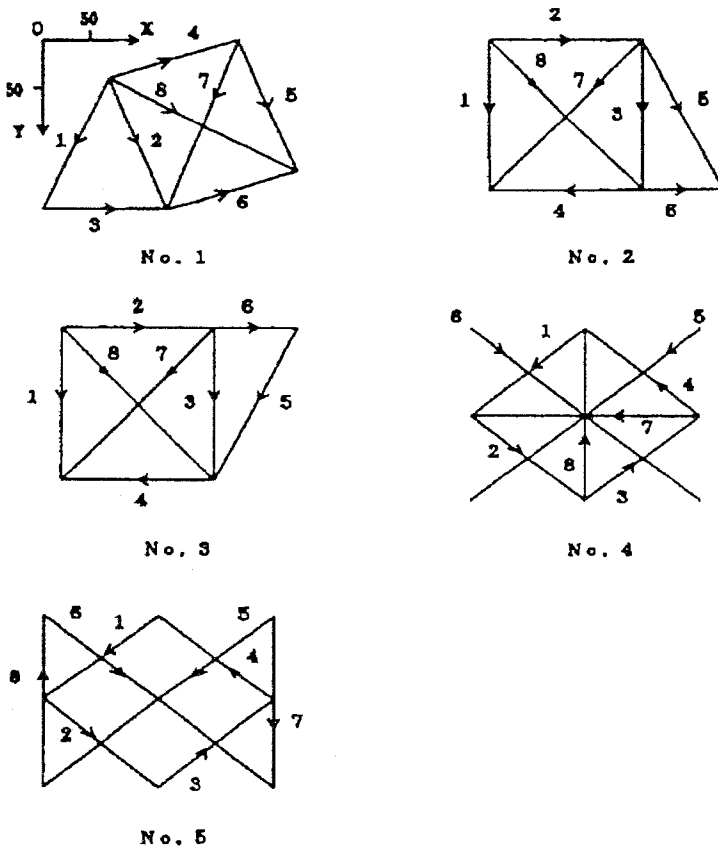


図 III.2.1-2 標準パターン $\{D_N\}$ ($N=1, \dots, 5$)

これらの標準パターンの各端点の位置座標に、ランダムなノイズを加えて作成した変形パターンを入力図形として標準パターンとのマッチングをとり、さらに、パターン間の類似度を計算して認識を行うものとする。ただし、計算の高速化のために、(III.2.1-3)の代わりに次の(III.2.1-3')を近似として用いる。

$$\frac{dU_{i,\ell}}{dt} \approx -(p_{i,\ell} - q_{i,\ell}) \quad (\text{III.2.1-3}')$$

また、(III.2.1-6)の適合係数 $r_{ij}(l,s)$ としては、2組の線分関係 (i,j) と (l,s) との不一致度を定量的に表現する6つの特徴量 $\epsilon_{1N}(i,j,l,s)$ ($N=1,\dots,6$)を用い、対応する線分間の一致度を表す $e_{i,\ell}$ としては、2つの特徴量 $\epsilon_{0M}(i,l)$ ($M=1,2$)を用いて次のように定義した。なお、 $\epsilon_{1N}(i,j,l,s)$ と $\epsilon_{0M}(i,l)$ とは $[-1,1]$ の範囲の実数値に正規化されており、その具体的な形は付録Bに示した。

$$r_{ij}(l,s) \equiv \begin{cases} -\sum_{N=1}^6 \alpha_{1N}^{(i,j)} \epsilon_{1N}(i,j,l,s) \\ \quad \text{if } l \neq s \wedge l \neq \lambda_{NIL} \wedge s \neq \lambda_{NIL} \\ -\sum_{N'=2,4,5,6} \alpha'_{1N'}^{(i,j)} \epsilon_{1N'}(i,j,l,s) - \delta \\ \quad \text{if } l = s \wedge l \neq \lambda_{NIL} \wedge s \neq \lambda_{NIL} \\ -c_2^{(i,j)} \text{ if } l \neq \lambda_{NIL} \wedge s = \lambda_{NIL} \\ -c_3^{(i,j)} \text{ if } l = \lambda_{NIL} \wedge s \neq \lambda_{NIL} \\ -c_4^{(i,j)} \text{ if } l = \lambda_{NIL} \wedge s = \lambda_{NIL} \end{cases} \quad (\text{III.2.1-8})$$

$$e_{i,\ell} \equiv \begin{cases} -\sum_{M=1}^2 \alpha_{0M}^{(i)} \epsilon_{0M}(i,\ell) & \text{if } l \neq \lambda_{NIL} \\ -c_1^{(i)} & \text{if } l = \lambda_{NIL} \end{cases} \quad (\text{III.2.1-9})$$

ただし、 λ_{NIL} は、NILラベル（対応するラベルがない場合に付けるラベル）を表し、 $\{\alpha_{0M}^{(i)}\}$ 、 $\{\alpha_{1N}^{(i,j)}\}$ 、 $\{\alpha'_{1N'}^{(i,j)}\}$ 、 $\{c_1^{(i)}\}$ 、 $\{c_k^{(i,j)}\}$ 、 δ はパラメーターである。

(III.2.1-8)で、 $l=s$ の場合には定義できない関数もあり、また、同一のユニットに複数のラベルが割り当てられるのを防ぐための反発力 δ を導入したこともあり、 $l \neq s$ の場合とは区別した。また、以下では、標準パターンのユニットを i,j で表し、入力図形のユニットをラベルと考えて l,s で表すことにする。

さて、これらのパラメーターと $\{h^{(i)}\}$ の初期値はマッチングや認識の結果に大きな影響を与えると考えられるが、本モデルでは次のような学習により定めることにする。まず、教師データ $(\{p_{i,l}^t\}, \{q_{i,l}^t\})$ ($i=1, \dots, n, l=1, \dots, m$)を用意する。 $\{p_{i,l}^t\}$ をp層に提示して固定したときに、(III.2.1-6)と(III.2.1-7)の計算により、q層上にパターン $\{q_{i,l}^t\}$ が直ちに想起されるのが望ましいと考えられるので、次の誤差関数 E_{err} の極小値を最急降下法により探索する。

$$E_{err} \equiv \frac{1}{2} \sum_i \sum_l (q_{i,l}^t - q_{i,l})^2 \quad (III.2.1-10)$$

すなわち、学習したいパラメーターを ω とすると、p層を $\{p_{i,l}^t\}$ に固定しながら、

$$\frac{d\omega}{dt} \equiv -\frac{\partial E_{err}}{\partial \omega} \quad (III.2.1-11)$$

により ω の値を更新していく。ただし、 $\{\alpha_{0M}^{(i)}\}$ 、 $\{\alpha_{1N}^{(i,j)}\}$ 、 $\{\alpha'_{1N}^{(i,j)}\}$ の値には非負という条件を付けた。

III.2.2 Rosenfeld 型の緩和法

比較のためにRosenfeld型の緩和ラベリング法（非線形確率モデル）の適用も考える。III.1で述べたように、この場合の状態更新ルールは、ある多項式関数の極大値探索のために growth operator を用いたものと同じである[Ejima88]。多項式関数としては、パターン間の類似度を表す次の E_R を用いる。

$$E_R \equiv \sum_i \sum_l P_{i,l} Q_{i,l} \quad (III.2.2-1)$$

(III.2.2-1)の $Q_{i,l}$ は、(III.2.1-6)と同様な式で定義されるが、(III.2.1-6)の適合係数 $r_{i,j}(l,s)$ と $e_{i,l}$ が負の値をとらないように、(III.2.1-8),(III.2.1-9)で、 δ を取り除き、 $-\epsilon_{1N}(i,j,l,s)$ を $[1-\epsilon_{1N}(i,j,l,s)]/2$ に、 $-\epsilon_{1N'}(i,j,l,s)$ を $[1-\epsilon_{1N'}(i,j,l,s)]/2$ に、 $-\epsilon_{0M}(i,l)$ を $[1-\epsilon_{0M}(i,l)]/2$ に置き換え、さらに $-c_k^{(i,j)}$ と $-c_1^{(i)}$ の符号を変えた表式を $r_{i,j}(l,s)$ と $e_{i,l}$ の定義式とした。

そこで、growth operator を一回作用させた後の $\{p_{i,l}\}$ を $\{p'_{i,l}\}$ とすると、

$$p'_{i,l} = \left(p_{i,l} \frac{\partial E_R}{\partial p_{i,l}} \right) / \left(\sum_s p_{i,s} \frac{\partial E_R}{\partial p_{i,s}} \right) \quad (\text{III.2.2-2})$$

により状態が更新される。この場合、 $p'_{i,l} \geq 0$ 、 $\sum_l p'_{i,l} = 1$ が成立している。

ところで、緩和ラベリング法の評価関数(目的関数)として、(III.2.1-1)で表されるニューラル緩和ラベリング法の E と、(III.2.2-1)で表されるRosenfeld型の緩和ラベリング法(非線形確率モデル)の E_R とを比較すると、前者はマッチングの整合度を、後者はパターン間の類似度を意味しているのがわかる。マッチングの正確さが第一に要求される場合には、前者の方が評価関数としては望ましいと考えられる。

III.2.3 実験

【入力パターンの作成】

図 III.2.1-2 に示した 5 個の標準パターン D_N ($N=1, \dots, 5$) を構成する各線分の端点の位置座標に、平均値が 0 の正規分布に従うランダムノイズを加える。標準偏差の値としては、 $\sigma=5, 10, 20, 30, 40, 50$ の 6 種類の値を考え、各標準パターンに対して各 σ の値ごとにそれぞれ 100 個ずつの変形パターン $\{\Omega_{\sigma,N}\}$ を作成した。 $\Omega_{\sigma,1}$ に属する変形パターンの一例を図 III.2.3-1 に示す。

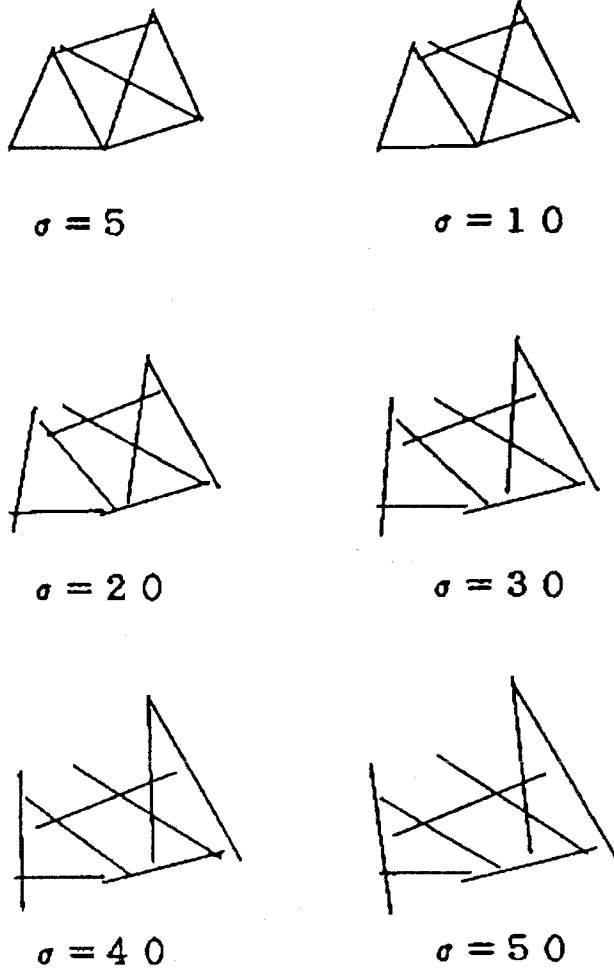


図 III.2.3-1 標準パターンNo.1(D₁)から作成された変形パターン($\Omega_{\sigma,1}$)の一例.

【学習によるパラメータ値の設定】

パラメータの初期値 (未学習) として、次の2つのセット{ ω_A }, { ω_B }を考えた。

(A){ ω_A } :

$$\alpha_{0M}^{(i)} = \alpha_{1N}^{(i,j)} = \alpha'^{1N'}_{1N'} = 0.1, \quad c_1^{(i)} = c_k^{(i,j)} = 0, \quad h^{(i)} = 0, \quad \delta = 1.0.$$

(B){ ω_B } :

$$\alpha_{01}^{(i)} = 0.1, \quad \alpha_{02}^{(i)} = 0.2,$$

$$\alpha_{1N}^{(i,j)} = 0.2 + 0.1 \times N \quad \text{for } N=1, \dots, 6,$$

$$\alpha'^{1N'}_{1N'} = 0.9, 0.1, 0.2, 0.3 \quad \text{for } N'=2, 4, 5, 6,$$

$$c_1^{(i)} = c_k^{(i,j)} = 0.01, \quad h^{(i)} = \delta = 0.$$

$\{\omega_A\}$ では各特徴量を対等に扱い、 $\{\omega_B\}$ では適当な強さの比に設定している。学習には、対象物、モデル共に各標準パターンを用い、p層に提示する教師データは広い引き込み領域を形成するために、 $p_{i,1}^i=1/\sum_l 1$ とし、q層に提示する教師データにはマッチングの正解を与えた。学習時のパラメータの値の更新には、

(III.2.1-11)において時間幅 $\Delta t=0.1$ とする離散時間近似を用い、200回の更新を行った。ただし、パラメータの更新後、(III.2.1-10)で表されている E_{err} が増加するようであれば、その時点から時間幅を短くして(Δt を $0.2 \times \Delta t$ とする)更新をやり直した。

$\{\alpha_{0M}^{(i)}\}$ 、 $\{\alpha_{1N}^{(i,j)}\}$ 、 $\{\alpha'_{1N}^{(i,j)}\}$ については、毎回の更新ごとに負の値になるかどうかをチェックし、負の値になるようであれば値を0にするという処理を行なった。また、上記以外の定数は、 $\beta_{02}=\beta_{12}=\beta_{14}=\beta_{15}=\beta_{16}=R_{14}=R_{15}=50$ 、 $x_2=1.0$ と設定した。こうして得られたパラメータのセットを $\{\omega'_A\}$ 、 $\{\omega'_B\}$ で表す。

【マッチング】

次の6種類のマッチング実験を行った。5種類の標準パターン D_N と、各標準パターンに対応する変形パターン $\{\Omega_{\sigma,N}\}$ との線分マッチングにおいて、

- (A 1) : $\{\omega_A\}$ を用いてRosenfeld型の緩和ラベリング法を適用、
- (A 2) : $\{\omega_A\}$ を用いてニューラル緩和ラベリング法を適用、
- (A 3) : $\{\omega'_A\}$ を用いてニューラル緩和ラベリング法を適用、
- (B 1) : $\{\omega_B\}$ を用いてRosenfeld型の緩和ラベリング法を適用、
- (B 2) : $\{\omega_B\}$ を用いてニューラル緩和ラベリング法を適用、
- (B 3) : $\{\omega'_B\}$ を用いてニューラル緩和ラベリング法を適用。

また、(III.2.1-3')での時間幅は $\Delta t=0.1$ とし、状態の更新回数は30回、 $p_{i,1}$ の初期値は $e_{i,1}$ の値に比例させて設定した[Igarashi91]。(III.2.1-4)と(III.2.1-7)のsigmoid関数中の定数は、 $h_1=0$ 、 $x_1=x_2=0.1$ と設定し、傾斜が急な入出力関数を用いた。

【認識】

上記の6種類のパターンマッチング実験に対応して、6種類のパターン認識実験を行った。(A1)-(A3),(B1)-(B3)において、各変形パターン ($\in \Omega_{\sigma,N}$) と、全ての標準パターン $D_N(N=1,\dots,5)$ とマッチングをとる。マッチング後に、変形パターンと標準パターンとの類似度 E_R を計算し、最も類似度の高い標準パターンを認識結果とする。このときの類似度 E_R は、Rosenfeld型の緩和ラベリング法(実験A1,B1)の(III.2.2-1)で定義されるが、ニューラル緩和ラベリング法(実験A2,A3,B2,B3)では適合係数 $r_{ij}(l,s)$ の計算には(III.2.1-8)と(III.2.1-9)を用いるので、Rosenfeld型の緩和ラベリング法の場合とは若干異なる。類似度計算の後、その変形パターンの原形となった標準パターンを正解パターンとして認識率の計算を行う。

III.2.4 実験結果と考察

マッチング実験では、1つの図形に関して全ての構成線分のマッチングが正しく行われた場合を正マッチングとする。正マッチング数 $M_{\sigma,N}$ をカウントし、各 σ ごとに平均マッチング率 μ_{σ} を $\mu_{\sigma} \equiv 100 \times \sum_N M_{\sigma,N} / \sum_N 100$ で定義する。また、各 (σ,N) に対して正しく認識できた変形パターンの個数 $L_{\sigma,N}$ をカウントし、各 σ ごとに平均認識率 ρ_{σ} を $\rho_{\sigma} \equiv 100 \times \sum_N L_{\sigma,N} / \sum_N 100$ で定義する。 μ_{σ} と ρ_{σ} の計算結果をそれぞれ表III.2.4-1と表III.2.4-2に示した。

σ	A1	A2	A3	B1	B2	B3
5	100(%)	100	100	100	100	100
10	100	100	100	100	93.6	100
20	96.0	99.2	99.2	93.8	67.0	98.2
30	76.8	95.0	95.4	70.0	32.2	89.8
40	44.8	79.8	83.4	37.6	9.4	64.0
50	16.4	43.0	55.6	13.6	2.0	28.6

表III.2.4-1 平均マッチング率 μ_{σ}

σ	A1	A2	A3	B1	B2	B3
5	100(%)	100	100	100	100	100
10	100	100	100	100	100	100
20	100	100	100	100	99.8	100
30	98.8	99.6	99.6	97.4	87.6	98.2
40	90.4	93.6	96.0	83.8	58.4	83.2
50	68.8	76.2	81.8	62.6	42.0	59.0

表III.2.4-2 平均認識率 ρ_{σ}

表III.2.4-1と表III.2.4-2とからわかるように、パラメータの初期値が $\{\omega_A\}$ であるときには、全ての σ の値において、(A3)>(A2)>(A1)の順で高い平均マッチング率 μ_σ と平均認識率 ρ_σ が得られた。しかし、パラメータの初期値を $\{\omega_B\}$ に替えると、必ずしも上の順序が成立せず、 ρ_σ は、(B3)>(B1)>(B2)の順となり、たとえパラメータを学習しても本方式ではRosenfeld型の緩和ラベリング法よりも良い認識率を与えているとはいえないが、 μ_σ の方はパラメータを学習するとかなり良い結果を与えている。従って、(III.2.1-11)により学習されたパラメータを用いたニューラル緩和ラベリング法は、Rosenfeld型の緩和ラベリング法よりもかなり高いマッチング率と同程度以上の認識率を与えているといえる。

また、パラメータの初期値としては、 $\{\omega_B\}$ より $\{\omega_A\}$ の方が良い結果を与えているが、Rosenfeld型の緩和ラベリング法では両者の差は小さいという特徴が見られる。一方、ニューラル緩和ラベリング法ではパラメータの学習が可能であるが、グローバルな最適値を求めるのは(III.2.1-11)のような最急降下法では難しいので、パラメータの初期値の選択に依存することは避けられない。しかし、6種類の実験(A1)-(A3),(B1)-(B3)を通して、結果を比較すると、入力パターンの変形の大きさの目安となる σ のどの値に対しても、学習済みのパラメータを用いたニューラル緩和ラベリング法(A3)が、平均マッチング率 μ_σ 、平均認識率 ρ_σ 、ともに最高値を記録しており、ニューラル緩和ラベリング法における学習の有効性を裏付けている。

なお、実験には大型計算機IBM3090-20E(31.4MIPS)を使用した。認識実験に要した1パターン当りの計算時間は、Rosenfeld型の緩和ラベリング法の場合には約1.29秒、ニューラル緩和ラベリング法の場合には約1.30秒であり、両者による計算時間の差はほとんど見られなかった。これは、今回の実験では(III.2.1-3')の近似を採用したために、計算量はRosenfeld型の緩和ラベリング法と同程度(図形を構成する線分の本数を n とすると、 $O(n^4)$ 程度)になるからと考えられる。また、学習時間は標準パターンを構成する線分の本数に大きく依存すると考えられるが、本実験の

場合(8本)には、1つの標準パターンを学習するのに約36分程度(学習回数200回)の計算時間を要した。

次に、学習されたパラメータの値、 $\{\omega_A'\}$ と $\{\omega_B'\}$ について考察する。例としてNo.1の標準パターン D_1 に属するパラメータの内、 $\{\alpha^{(i,j)}_{13}\}$ と $\{\alpha^{(i,j)}_{14}\}$ ($i,j=1,\dots,8$)を取り上げる。これら2種類の係数は、それぞれ(III.2.1-8)の適合係数を計算する際の特徴量、 $\epsilon_{13}(i,j,l,s)$ (線分*i*と*j*のなす角度と、線分*l*と*s*のなす角度との不一致度)と $\epsilon_{14}(i,j,l,s)$ (線分*i*と*j*の端点間距離の最小値と、線分*l*と*s*の端点間距離の最小値との不一致度)に乗ぜられる重み係数である。 $\{\omega_A'\}$ の例を、表III.2.4-3と表III.2.4-4とに示す。表III.2.4-3では、各*i*の横の列の中で、値が最大の重み係数に対しては下線が引かれてある。表III.2.4-4では、端点同士が接続してない線分の値には網かけが施されている。

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-	0.083	0.079	0.084	0.083	0.084	<u>0.112</u>	0.084
2	0.000	-	0.000	0.043	<u>0.108</u>	0.043	0.000	0.000
3	0.063	0.063	-	<u>0.105</u>	0.063	<u>0.105</u>	0.063	0.091
4	0.038	0.056	0.093	-	0.056	<u>0.132</u>	0.034	0.040
5	0.043	0.085	0.067	<u>0.102</u>	-	<u>0.102</u>	0.040	0.038
6	0.000	0.038	0.058	<u>0.135</u>	0.038	-	0.000	0.000
7	<u>0.112</u>	0.055	0.055	0.052	0.055	0.052	-	0.070
8	0.081	0.101	<u>0.109</u>	0.098	0.101	0.098	0.081	-

表III.2.4-3 標準パターン D_1 に対する $\{\alpha^{(i,j)}_{13}\}$ の学習結果(初期値: $\{\omega_A\}$)。

下線は、各線分*i*の中で値が最大の重み係数であることを表している。

$i \setminus j$	1	2	3	4	5	6	7	8
1	-	0.000	0.000	0.000	0.152	0.150	0.150	0.000
2	0.200	-	0.200	0.200	0.109	0.200	0.200	0.200
3	0.000	0.000	-	0.161	0.156	0.000	0.000	0.156
4	0.083	0.083	0.113	-	0.083	0.113	0.083	0.083
5	0.152	0.152	0.152	0.000	-	0.000	0.000	0.000
6	0.115	0.108	0.108	0.117	0.108	-	0.108	0.108
7	0.118	0.095	0.095	0.095	0.095	0.095	-	0.119
8	0.077	0.077	0.116	0.077	0.077	0.077	0.116	-

表III.2.4-4 標準パターン D_1 に対する $\{\alpha^{(i,j)}_{14}\}$ の学習結果(初期値: $\{\omega_A\}$)。

網かけは、各線分*i*に対して端点同士が接続してない線分を表している。

表III.2.4-3の重み係数 $\{\alpha^{(ij)}_{13}\}$ の値を見ると、標準パターン D_1 を構成する線分 $i=1$ に対しては、線分 $j=7$ に対応する重み係数の値が最大となっており、特徴量 ϵ_{13} の観点からは、線分 $i=1$ と最も特徴的な関係があるのは線分 $j=7$ であることを示している。実際に、図III.2.1-2で確かめると、 D_1 の線分 $i=1$ と $j=7$ とはほぼ平行関係にある。同様にして、ほぼ平行関係にある線分の組 $(i,j)=(2,5),(3,4),(3,6),(4,6),(6,4),(7,1)$ に対して重み係数が大きくなっており、システムは学習により学習パターンに存在する、線分間の"平行関係"を特殊な特徴ととらえて、パラメータ値の中に表現していることがわかる。また、線分 $i=5$ の場合は、線分 $j=4,6$ に対する重み係数の値が大きくなっており、線分間の"直交関係"が特殊な特徴ととらえているのがわかる。

表III.2.4-4を見ると、各線分 i に対して重み係数 $\{\alpha^{(ij)}_{14}\}$ が大きくなっているのは、線分 i と端点同士が接続していない線分である(ただし、線分 $i=2$ の場合は、接続していない線分 $j=5$ の値だけが小さくなっている)。従って、システムはお互いの端点同士が接続しているという、線分間の"接続関係"という特徴をとらえていると言える。 $\{\omega_B\}$ の値に関しても、上で述べた $\{\omega_A\}$ の場合と同様な傾向が見られる。

本実験を以下で簡単にまとめる。適合係数の計算に必要な線分間の特徴量の重み係数を、モデルパターン(標準パターン)ごとにニューラル緩和ラベリング法により学習することが可能である。学習により、システムは線分間の平行な関係、直交の関係、端点の接続関係などの学習パターン(ここでは標準パターンを用いた)に特有な特徴を捕捉し、それらの特徴は重み係数というパラメータの値の中に表現される。学習されたパラメータを用いたニューラル緩和ラベリング法は、従来法の代表例であるRosenfeld型の緩和ラベリング法よりも高い線画マッチング能力と図形認識能力を持つことが可能であることを本実験により示すことができた。

しかしながら、現在のニューラル緩和ラベリング法による認識は、認識スピード(マッチングスピード)の点でまだ不十分である。高速化のためには、ニューロン間の相互作用が及ぶ範囲を限定することや、最初の段階でラベル候補の枝刈りを行なうなどの前処理が必要となろう。また、手書き漢字認識などの問題に応用す

る際には、パラメータの値を格納しておくメモリの総量や、複数の入力線分と1本の辞書線分との対応を考慮すること[Yamamoto82]や、適切なパターン間の類似度の定義などが問題となるであろう。学習方式に関しても、教師データとしてモデルパターン(標準パターン)だけではなく、変形パターンも用いたり、対象図形とモデルパターンとが異なるカテゴリーに属する場合も考えられる。さらには、図形を構成する線分の本数が多くなっても、学習時間が爆発的に増大しないような工夫も必要である。

第IV章 2層確率場モデルによる逆問題の解法

IV.1 エネルギー最小化と逆問題

ベクトル X (m 次元), Y (n 次元)の間に、 $Y=AX$ という写像関係が成り立っていると
 する。写像 A は一般には非線形な写像であり、既知とする。ここで、ベクトル X を
 与えてベクトル Y を求める問題を、"順問題"(forward problem)と定義する。逆に、
 ベクトル Y を与えて $Y=AX$ を満たすベクトル X を求める問題を、"逆問題"(inverse
 problem)と定義する。もし、 A が線形写像で行列を用いて表せるならば、 $Y=AX$ の
 逆問題は連立1次方程式の問題に帰着する。この場合には、 $m=n$ で A が正則ならば
 A の逆行列 A^{-1} や、 $m \neq n$ でも $\text{rank}(A \ Y)=\text{rank}(A)$ ならば一般逆行列($A^{\#}$: $AA^{\#}A=A$)を用い
 て $Y=AX$ の逆問題を解くことができる(i.e., $X=A^{\#}Y$ は1つの解)。

しかしながら、 A が非線形写像であればこのような行列計算で逆問題を解くこと
 はできない。たとえ A が線形であっても、次元が高すぎて計算しにくい場合もある。
 また、問題によっては完全な Y のデータを与えることができない場合もある。そこ
 で、 $Y=AX$ の逆問題を解く一般的な方法として、次の目的関数 J の最小化の問題に
 帰着させる方法が考えられる。

$$J(X) \equiv \|Y - AX\|^2 \quad (\text{IV.1-1})$$

ここで、ベクトル X の各要素 x_i ($i=1, \dots, m$)をニューロンとみなし、(IV.1-1)の J をニュー
 ロン系のエネルギー関数 E と見なせば、 $Y=AX$ の逆問題は、ニューロン系のエネ
 ルギー最小化問題に帰着することができる。逆問題を、ニューロン系のエネルギー
 最小化問題に帰着することの利点を考えてみると、

(i) 解が一意的に定まらないような(不良設定な)逆問題である場合には、解に関する知識をエネルギーの形に表現して、(IV.1-1)の右辺に加えることにより簡単に利用することができる。

(ii) 写像Aが非線形写像であっても取り扱うことができる。

(iii) 計算原理が簡単で、かつ、並列処理が可能である。

(iv) 近似解を高速に求めることができる。

という点を挙げるることができる。

画像復元(image restoration)の問題は、典型的な逆問題の一種である。この場合は、Xが推定画像に、Yが観測された劣化画像に、Aが歪みやボケなどの劣化作用素を表しており、多くの場合線形であると仮定されている。この場合は、線形写像Aのほかにノイズの項も加わる(i.e., $Y=AX+n$, n :ノイズ)ので、上のように単純ではないが、種々の評価関数(Jに相当)の最小化をLagrangeの未定乗数法で行なうと、それに応じた逆フィルター(ウィーナーフィルター、一般逆フィルター、制限付き最小2乗フィルター、射影フィルターなど)を統一的に導出することができる[Takagi91]。従って、写像が線形の場合であっても、目的関数(エネルギー)最小化の問題に帰着させることにより問題の解法の見通しが良くなることが期待できる。これも、逆問題をエネルギー最小化問題に帰着させることの利点の1つと言える。

IV.2 視覚情報処理における逆問題とニューロコンピューティング

本節(IV.2)では、ニューロコンピューティングによる逆問題の解法の例として、視覚情報処理の問題を取り上げる。視覚の問題は、すべてニューロン素子の相互作用により処理されているはずで、生体はその証拠である。従って、ニューロコンピューティングによる逆問題の解法を考える上で、例題に適していると考えられる。

IV.2.1 標準正則化理論

一般に、生体における初期視覚(early vision)[Poggio85]の問題においても、工学のコンピュータビジョン(computer vision)の分野においても、対象物体の状態(S)をある限られた間接的な観測データ(I)だけから推定することが必要となってくる。例えば、網膜ないしはフィルム上に投影された1枚または数枚の2次元画像から3次元可視表面を再構成するというような問題である。また、観測データだけでなく、トップダウン的に得られた情報(または仮説)を拘束条件(I')として内部モデル(S')を再構成することも同様な問題と考えられる。例えば、濃度に関する観測データの他にエッジ情報を与えて濃度情報を充填する問題(filling-in)などである。これらの問題は、 $I=RS$ (または $I'=R'S'$)の逆問題と定式化される。ただし、 $R(R')$ は、 $S(S')$ から $I(I')$ への写像で一般には非線形な写像である。視覚情報処理の場合には、 R は"光学"(optics)と呼ばれている。

しかしながら、この種の問題は、いわゆる"不良設定問題"(ill-posed problem: 解が一意的に存在しない、または、観測データに連続的でない)であり、一般的な条件のもとで $I(I')$ から $S(S')$ を一意的に決定するのは難しい場合が多い。

Poggio-Torre-Kochら[Poggio85]は、 S から I への写像 R (光学)と、 S に関する事前知識

だけを用いた一つの解決法を提案し、これがそれまでに提案されてきたいくつかのアルゴリズムの一般化された理論(標準正則化理論, Standard regularization theory)であることを示した。具体的には、変分法を用いて、次の評価関数 $E(S; \lambda)$ を最小にする S を推定するという方法である。

$$E(S; \lambda) \equiv \|I - RS\|^2 + \lambda \|PS\|^2 \quad (\text{IV.2.1-1})$$

ここで、第1項は推定された S が観測値 I に対してどの程度妥当であるかという目安を与えており、第2項は S に関する事前知識を表わしている。また、 P は S に関する事前知識を表わす作用素、 λ は第1項と第2項との重み付けを表わす"正則化パラメータ"である。標準正則化理論では、(IV.2.1-1)に変分法を用いて得られるEuler-Lagrange方程式が一意的な解を持つために、(IV.2.1-1)の R や P は線形演算子であることを要請している。

コンピュータービジョンの分野においては、結果的には、この標準正則化理論の応用に属すると見なすことができる研究が数多く行なわれたきた。例えば、エッジ抽出[Poggio85-2]、速度場の検出[Horn81]、3D曲面の補間[Terzopoulos86]、陰影からの面の向き推定[Ikeuchi81]、運動やステレオ画像からの3D物体の構造の推定などの研究[Ullman84][Yuille91]である。これらの研究で用いられたエネルギー関数 E の例を図IV.2.1-1に示す[Poggio85]。また、コンピュータービジョンのような工学的な方面への応用だけでなく、人間の視覚情報処理のモデルとしても有力視されている。

しかし、エネルギー関数中の正則化パラメータ λ の値は、Cross-validationを用いた方法で求めることが提案されている[Wahba90]が、 R が線形という制限や、 λ がglobalに定義されている必要があり、また、計算量が膨大であるという欠点もある。ビジョンの分野では、正則化パラメータ λ の値は経験的に定めていたのが実情である。

$$\begin{aligned}
 \text{Edge detection: } & \int [(Sf - i)^2 + \lambda(f_x)^2] dx \\
 \text{Optical flow(area based): } & \int [(i_x u + i_y v + i_t)^2 + \lambda(u_x^2 + u_y^2 + v_x^2 + v_y^2)] dx dy \\
 \text{Surface reconstruction: } & \int [(Sf - h)^2 + \lambda(f_x^2 + 2f_{xy}^2 + f_{yy}^2)] dx dy \\
 \text{Shape from shading: } & \int [(I - R(p, q))^2 + \lambda(p_x^2 + p_y^2 + q_x^2 + q_y^2)] dx dy \\
 \text{Stereo: } & \int \{ \nabla^2 G * (L(x, y) - R(x + d(x, y), y)) \}^2 + \lambda(\nabla d)^2 dx dy
 \end{aligned}$$

state (S) → f; surface, (u,v); velocity, (p,q); surface gradient, d; disparity
 observed data(I) → i; image data, h; depth, I; brightness, L(R); left(right) image
 optics(R) → S; sampling operator, R; reflectance map [Poggio85]

図IV.2.1-1 初期視覚問題で用いられたエネルギー関数Eの例[Poggio85].

IV.2.2 結合MRFモデル

標準正則化理論で用いられたエネルギー最小化という考えを基に、画像強度とその不連続性を表現する線過程(line process)[Geman84]とがエネルギー的に結合した、“結合MRFモデル”(Coupled Markov random field model)を考えると、種々の視覚現象が説明できることが報告されている。例えば、画像強度(明るさ)が連続的に変化している所で明暗のバンドが見えるマツハ・バンドの現象[Fiorentini72]や、局所的な明るさの変化のために広範囲の明るさが実際と異なって見えるクレイク・オブライエン錯視の現象[Burr87]等が、“結合MRFモデル”(Coupled Markov Random Field model)の枠組みで統一的に説明できることが計算機実験を通して示されている[Hongo92]。このときに用いられたエネルギー関数を(IV.2.2-1)に示す。

$$E = E_D + \lambda E_I + \gamma E_L \tag{IV.2.2-1}$$

$$\left[\begin{aligned}
 E_D & \equiv \int \{f(x) - d(x)\}^2 dx \\
 E_I & \equiv \int \{1 - l(x)\} \{ \partial^2 f(x) / \partial x^2 \}^2 dx \\
 E_L & \equiv \int l(x) \{1 - l(x)\} dx + (\epsilon / \gamma) \int l(x) dx
 \end{aligned} \right]$$

ここで、 E_D は観測された画像強度 $d(x)$ による制約項、 E_I は滑らかさによる制約項(薄板のエネルギー)、さらに E_L は線過程 $l(x)$ に関する制約項(2値であるための制約、不連続を検出する感度に関する制約)である。(IV.2.2-1)からもわかるように、結合MRFモデルでは、2種類以上の場がエネルギー的に強く結合して、相互作用を行っているのがわかる。

また、心理学的な研究からも、疎なドットを用いたステレオグラムの実験において、面が知覚され、さらに面の奥行きの不連続が明確に見えるという実験結果[Julesz71]や、静止網膜像における明るさと色の情報が、境界領域から内部に充填されていくという、"filling-in"現象が、画像強度と線過程の結合MRFモデルの妥当性を示している。上記以外にも、結合MRFモデルは3次元面の補間[Koch86]やステレオ視のモデル[Marroquin85]としても用いられている。

IV.2.3 川人-乾の視覚情報処理モデル

標準正則化理論や結合MRFモデルにおいて、エネルギー関数を導出する際には、MAP推定(Maximum a posteriori estimate)をベースにしている。川人と乾は、視覚大脳皮質に見られる情報処理の階層性に注目して、標準正則化理論や結合MRFモデルと同じく、MAP推定から導かれる事後エネルギーを最小にするという枠組みの中で、視覚情報処理のモデルを提唱している[Kawato90][Kawato91]。

川人-乾の視覚情報処理モデルを簡単に説明する。一般に、観測データを I 、視覚の内部モデルを S 、光学を R で表す。Bayesの定理から、

$$P(S|I) = \frac{P(I|S)P(S)}{P(I)} \quad (\text{IV.2.3-1})$$

が成り立つ。 $P(S)$ は、内部モデル S のとりうる妥当性を確率で表している。 S の確率モデルとしてマルコフ性を仮定すれば(MRFモデル)、局所的な相互作用からな

るエネルギー $U(S)$ を用いて、 $P(S)$ はGibbs分布により $P(S)=e^{-U(S)}/\sum_s e^{-U(S)}$ と表される。さらに、 S が与えられたときの I の条件付き確率 $P(I|S)$ が、エネルギー $U(I|S)$ を用いて $P(I|S)\sim e^{-U(I|S)}$ と表されれば、事後エネルギーが次のように定義される。

$$U(S|I) \equiv U(I|S) + U(S) \tag{IV.2.3-2}$$

ここで、光学 $R(S \rightarrow I)$ の近似的な逆写像 $R^\#$ を用いて、

$$U(I|S) \approx \frac{1}{2} [R^\# \{I - R(S)\}]^2 \tag{IV.2.3-3}$$

と近似する。初期視覚のような不良設定問題においては、逆写像 R^{-1} を厳密に求めるのは困難であるが、近似的な逆写像 $R^\#$ を考えることは可能である。実際、コンピュータビジョンで提案されてきた多くの一撃アルゴリズム(One-shot algorithm)は、この $R^\#$ の具体例と見なすことができる。川人-乾の理論では、事後エネルギー $U(S|I)$ の最小値を与える状態 S を推定するために、最急降下法的に

$$S(0) = R^\#(I) \tag{IV.2.3-4}$$

$$\frac{dS(t)}{dt} = R^\# \{I - R(S)\} - \frac{\partial U(S)}{\partial S} \tag{IV.2.3-5}$$

により状態を更新することを提案している。これを模式的に表現したのが図IV.2.3-1である。また、(IV.2.3-5)は広義ニュートン法(最急降下法)により $I - R(S)$ の零点を求めるための近似式となっていることが示されている。

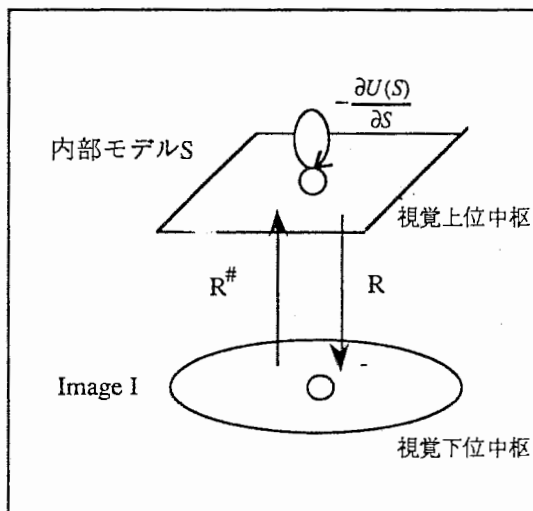


図 IV.2.3-1 川人-乾の視覚情報処理の計算モデル

IV.3 2層確率場モデルの一般論

IV.2では、視覚情報処理における不良設定な逆問題を解くための、エネルギー最小化によるアプローチ方法として、標準正則化理論、結合MRFモデル、川人-乾の計算モデルについて述べた。

しかし、標準正則化理論では、(IV.2.1-1)のエネルギー関数 E がただ1つの極小値を持つように2次形式のノルムを採用し、 R と P を線形演算子に限定している。もし、 R や P が非線形であれば、変分法を用いて得られるEuler-Lagrangeの微分方程式は、連立一次方程式とならず、一意的に解を求めることはできない。この場合には、 E の極小値の一つを最急降下法により求めるのが普通で、これは E の最小値とは限らない。さらに、 R や P が微分可能でない関数であれば、最急降下法を用いることもできない。また、結合MRFモデルでは、2つの確率場がエネルギー的に強く結合しており、そのままの形で視覚大脳皮質に見られる視覚情報処理の階層構造[Kawato90]を構築することには難がある。川人-乾の視覚情報処理モデルでは多層構造の構築は容易ではあるが、光学(R)に相当する2層間の写像の他に、良質な近似逆写像(逆光学 R^{-1})が必要である。しかし、高次視覚から初期視覚や中期視覚への写像 R の逆写像(R^{-1})を局所的な処理だけで表現するのは容易ではないと予想される。また、いずれのモデルにおいても、正則化パラメータ λ のような未知パラメータをエネルギー関数中に含んでおり、多くの場合、それらの値は経験的に選んでいる。

そこで、我々は、2層間の関係が、標準正則化理論のように、写像 $R(R')$ は与えられているが逆写像 $R^{-1}(R'^{-1})$ はわからない場合や、結合MRFモデルのように、エネルギー関数中に2層間の相互作用が表現されている場合の、いずれの場合においても適用できる数学的なモデル、"2層確率場モデル"を提案した[Igarashi92]。"2層確率場モデル"では、まず、対象となっている $I=RS$ の逆問題を、確率場間の逆問題に拡張する。解の満足すべき制約条件を表現した確率場(I に相当)と、解の候補

を表現する確率場(Sに相当)との2つの確率場を考える。後者の確率場では、その確率分布関数がエネルギー関数を用いたGibbs分布で与えられている。このエネルギー関数には、解に関する知識が反映されている。次に、前者の確率場にトップダウン的な情報として望ましい解に対する制約条件が確率分布の形で与えられた場合に、後者の確率場の最適な確率分布を推定する逆問題を考える。この際、前者の確率場の確率分布と、後者の確率場の確率分布を関連付ける変換(一般には非線形な演算子で、写像RやR'に相当する)として、Gidas [Gidas89]がスケールの異なる2つの画像強度過程上のマルコフ確率場(Markov Random Field; MRF)モデルを関連付けるために用いた"くりこみ変換"に類似した表式を用いる。さらに、この確率場間の逆問題の特別な場合として、1つの状態Iを与えて、1つの状態Sを推定する問題(I=RSの逆問題)を取り扱うことができる。この場合、(IV.2.1-1)のエネルギー関数Eで、ノルムが2次形式であるかどうかということや、RやPが線形演算子であるかどうかということには関係なく、また、Rの逆写像や導関数を用いることもなく、I=RSという逆問題をエネルギー関数最小化(正則化)の枠組みで解くことができる。この際、正則化パラメータのような重み係数等の値を適切な値に自動的に調節することが可能である。

IV.3.1 2層確率場モデル

本節では、I=RSの逆問題の解法に対する"2層確率場モデル"の一般論について述べる。まず、2つの格子点集合S,S'上で定義された確率場 (random field) をそれぞれX,X'とする。確率場Xの一つの実現値を ω とすると、 ω の出現する確率P(ω)はエネルギー関数E($\omega; \theta$)を用いて、次のGibbs分布(または、Boltzmann分布)

$$P(\omega; \theta, T) = \frac{e^{-E(\omega; \theta)/T}}{Z(\theta, T)} \quad (\text{IV.3.1-1})$$

で与えられるとする。ここで、 T は体系の"温度"を、 θ はエネルギー関数中の重み係数等のパラメータを表わすものとする。たとえば、(IV.2.1-1)における λ (正規化パラメータ)が θ の例である。また、 $Z(\theta, T)$ は規格化定数(または、分配関数)で、 $Z(\theta, T) = \sum_{\omega} \exp(-E/T)$ で定義されている。この体系の物理的な意味を統計物理学の言葉で述べるならば、各格子点上に定義された離散変数からなる正準集合を考えたことに相当する。正準集合の体系は、外界と相互作用があり、エネルギーのやりとりを行なっている。その結果、体系のエネルギーは時間的に一定ではなく、熱平衡状態では、(IV.3.1-1)で示したGibbs分布に従って状態が揺らいでいる。温度 T は、この熱的な揺らぎの大きさの目安を表している。

さらに、確率場 X' に ω' が生起される確率を与える分布関数 $\Pi(\omega')$ が、条件付き確率 $P(\omega' | \omega)$ を用いた変換 $R_G(P(\omega) \rightarrow \Pi(\omega'))$ ：

$$\Pi(\omega'; \theta, T) = \sum_{\omega} P(\omega' | \omega) P(\omega; \theta, T) \quad (\text{IV.3.1-2})$$

を通して分布関数 $P(\omega)$ と関係付けられていると仮定する。(IV.3.1-2)の条件付き確率を用いた変換 R_G は、Gidas[Gidas89]が画像修復の問題において、スケールの異なる2つの強度過程上のMRFモデルのエネルギー関数を関連付けるために用いた変換(統計物理学での"くりこみ変換")に類似している。

ここで、確率場 X'' (X' と同じ確率場、図IV.3.1-1参照)に ω' が出現する確率の分布関数 $\Pi_0(\omega')$ を与えて、変換 R_G の下で $\Pi(\omega')$ が $\Pi_0(\omega')$ と同一の分布関数となるような分布関数 $P(\omega)$ を推定する問題、すなわち、 Π として Π_0 を与えたときの $\Pi = R_G P$ の逆問題を考える。ただし、ここではエネルギー関数 $E(\omega; \theta)$ の形を固定しているため、結局はパラメータ θ の値を推定することになる。この逆問題の様子を図で表現すると図IV.3.1-1のようになる。

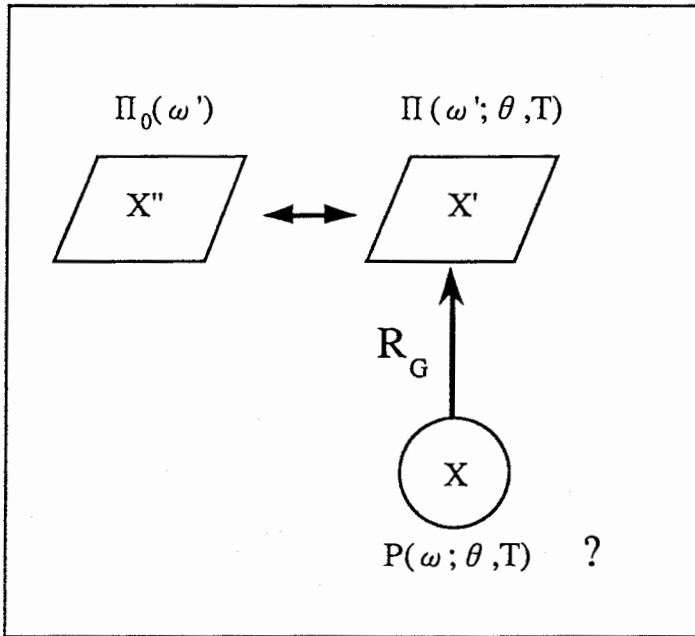


図 IV.3.1-1 2層確率場モデルにおける確率分布の推定

次に、拘束条件として与えた確率分布 $\Pi_0(\omega')$ と、 $P(\omega)$ に変換 R_G を作用させて得られた確率分布 $\Pi(\omega')$ との相違の度合いを表わす量として、次のカルバック情報量 G を用いる。

$$G(\theta, T) \equiv \sum_{\omega'} \Pi_0(\omega') \ln[\Pi_0(\omega') / \Pi(\omega'; \theta, T)] \quad (\text{IV.3.1-3})$$

ここで、常に $G(\theta, T) \geq 0$ が成立し、また、 $G(\theta, T) = 0$ となるのは2つの確率分布が完全に一致する場合だけである。ある温度 T において、 $G(\theta, T)$ の最小値を与える θ を求めるためには最急降下法を用いる。すなわち、パラメータの1つを θ とおくと、

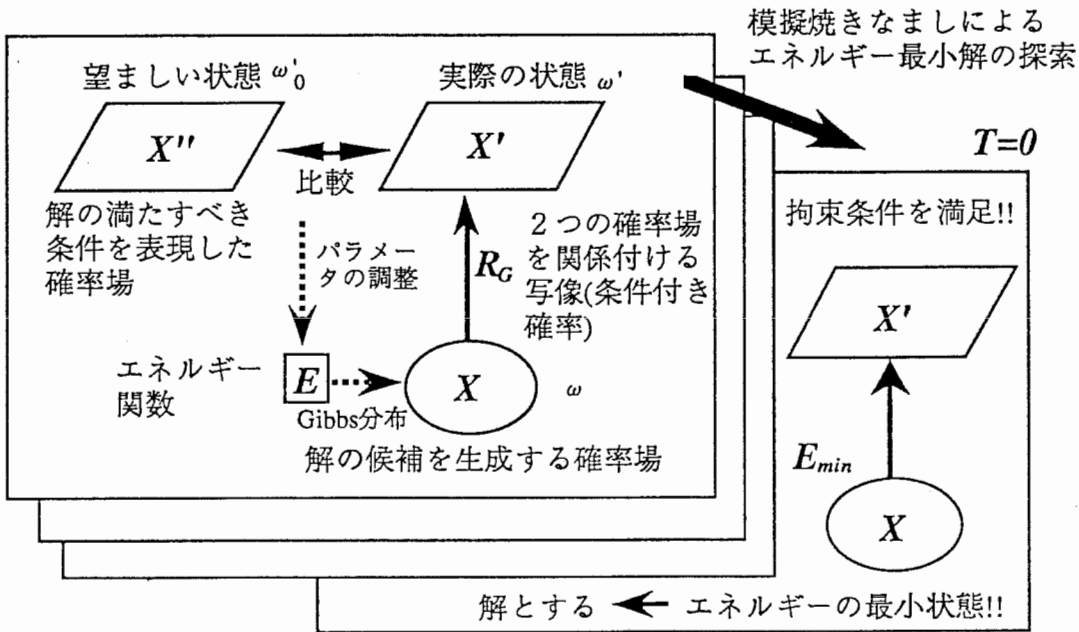
$$\frac{d\theta}{dt} = -\frac{\partial G}{\partial \theta} \quad (\text{IV.3.1-4})$$

$$= -\frac{1}{T} \sum_{\omega'} \left[\Pi_0(\omega') \sum_{\omega} \left\{ \frac{P(\omega' | \omega)}{\Pi(\omega'; \theta, T)} - 1 \right\} P(\omega; \theta, T) \frac{\partial E(\omega; \theta)}{\partial \theta} \right] \quad (\text{IV.3.1-5})$$

により θ の値を更新する。(IV.3.1-5)の右辺の値は、熱平衡状態で $P(\omega' | \omega)$ と $\partial E / \partial \theta$ の値を観測することで計算できる。

このパラメータの更新は、ある温度 T が一定の下で行なう。パラメータの更新

後は、温度を下げる。こうしてパラメータの更新とアニーリングによるエネルギー関数の最小状態の探索とを交互に繰り返すことにより、制約条件(確率場 X' 上での状態で表現されている)を満足するエネルギー関数の最小解を得ることが期待できる。この様子を図IV.3.1-2に示す。図IV.3.1-2では、制約条件として ω' が一意的に与えられた場合を示している。即ち、ある ω'_0 で、 $\Pi_0(\omega'_0)=1$ となり、それ以外の ω' で $\Pi_0(\omega')=0$ となる場合である。



図IV.3.1-2 2層確率場モデルの原理

図IV.3.1-2を用いて、2層確率場モデルの仕組みを以下にまとめる。上下2層のうち、下層の確率場 X は、エネルギー関数 E (事前知識 $P(S)$ と条件付き確率 $P(I|S)$)を用いて、解の候補となる状態を、温度 T を持つGibbs分布に従って生成しており、制約条件を表現した上層で、望ましい状態 ω'_0 が出現する確率が高くなるように、下層でのエネルギー関数 E 中のパラメータの値を自動調節する。このパラメータ調節操作とアニーリング操作とを交互に行なっていくと、下層はエネルギー関数 E の最小状態に収束し、かつ、その状態は制約条件を満足している。これが求めたい最適解である。従って、"2層確率場モデル"を用いた上記の方法は、 $I=RS$ の逆問

題をエネルギー最小化(正則化)の枠組みで求める一解法と言える。

この際、エネルギー関数 E が2次形式である必要はなく、非線形な演算子を含むことも許され、また、 R の逆関数や導関数を必要とすることもない。したがって、VI.2で述べた標準正則化理論、結合MRFモデル、川人-乾の視覚情報処理モデルなどで見られた欠点を生じないという特長がある。

IV.3.2 従来のモデルとの比較・関連

視覚情報処理の分野で提案されている、標準正則化理論、結合MRFモデル、川人-乾のモデルと、2層確率場モデルとの比較については、IV.3の冒頭で既に述べた。この節では、ボルツマンマシン[Ackley85]の確率分布の学習と2層確率場モデルのパラメータ更新則との関係について述べる。

II.1でも述べたように、ボルツマンマシンは、2値離散ニューロン(0 or 1)の集合からなるニューラルネットワークモデルで、2次関数のエネルギー関数(II.1-1)を持ち、ヒート・バス法(II.1-4)により状態を更新する確率的なモデルである。

ボルツマンマシンを確率分布の学習に用いるときには、学習すべき確率分布関数の種類により、(i)自己想起型と(ii)相互想起型の2種類のモデルに分類される。

(i) 自己想起型のボルツマンマシン：

入出力層と隠れ層とから構成される。ある確率分布 $\Pi_0(V_\alpha)$ を学習する。 V_α は入出力層のあるパターン α を表している。このときの、重み係数 w_{ij} の学習則は、次の、カルバック情報量

$$G \equiv \sum_{\alpha} \Pi_0(V_\alpha) \ln \left[\frac{\Pi_0(V_\alpha)}{\Pi(V_\alpha)} \right] \quad (\text{IV.3.2-1})$$

に対し、最急降下法を用いて、

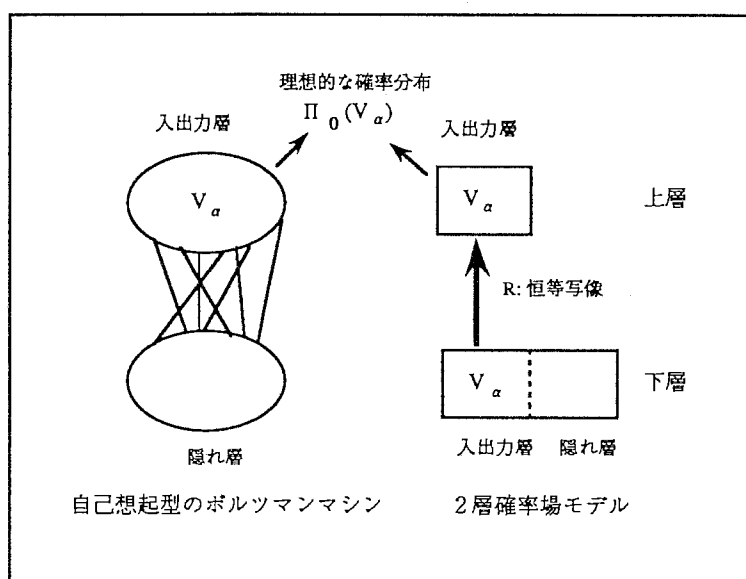
$$\frac{dw_{ij}}{dt} = -\frac{\partial G}{\partial w_{ij}} = \frac{1}{T} (\langle s_i s_j \rangle_0 - \langle s_i s_j \rangle) \quad (\text{IV.3.2-2})$$

である。 $\langle \rangle_0$ は、確率分布 $\Pi_0(V_\alpha)$ による平均操作を、 $\langle \rangle$ はfree runningでの観測値を表している。

2層確率場モデルの下層(V_{lower})をボルツマンマシンの入出力層+隠れ層に対応させ、このうちの入出力層を恒等写像によりコピーしたものを、2層確率場モデルの上層に対応させることができる。このとき、(IV.3.2-1)のカルバック情報量は、2層確率場モデルの上層におけるカルバック情報量(IV.3.1-3)と同一である。ただし、重み係数 w_{ij} の更新ルール(IV.3.1-5)は、(IV.3.2-2)とは異なり、

$$\frac{dw_{ij}}{dt} = -\frac{\partial G}{\partial w_{ij}} = -\frac{1}{T} \sum_{\alpha} \Pi_0(V_{\alpha}) \left\langle \left\{ \frac{P(V_{\alpha}|V_{lower})}{\langle P(V_{\alpha}|V_{lower}) \rangle} - 1 \right\} s_i s_j \right\rangle \quad (\text{IV.3.2-3})$$

となる。このように、自己想起型のボルツマンマシンと2層確率場モデルは容易に対応がつく。対応の様子を模式的に図V.3.2-1に示す。



図V.3.2-1 自己想起型のボルツマンマシンと2層確率場モデル

(ii) 相互想起型のボルツマンマシン：

入力層の状態を I_α 、出力層の状態を O_β 、学習させたい確率分布を $\Pi_0(O_\beta | I_\alpha)$ とおく。学習の度合いを表す評価関数として、次のカルバック情報量

$$G \equiv \sum_{\alpha} \sum_{\beta} P_0(I_\alpha \wedge O_\beta) \ln \left[\frac{\Pi_0(O_\beta | I_\alpha)}{\Pi(O_\beta | I_\alpha)} \right] \quad (\text{IV.3.2-4})$$

を定義する。(i)と同様に、最急降下法を用いて、

$$\frac{dw_{ij}}{dt} = -\frac{\partial G}{\partial w_{ij}} = \frac{1}{T} (p_{ij} - p'_{ij}) \quad (\text{IV.3.2-5})$$

と重み係数 w_{ij} の学習則は表される[Ackley85]。ただし、

$$p_{ij} \equiv \sum_{\alpha} \sum_{\beta} P_0(I_\alpha \wedge O_\beta) \langle s_i s_j \rangle_{I_\alpha, O_\beta} \quad (\text{IV.3.2-6})$$

$$p'_{ij} \equiv \sum_{\alpha} P_0(I_\alpha) \langle s_i s_j \rangle_{I_\alpha} \quad (\text{IV.3.2-7})$$

である。 p_{ij} は、入力層のパターンを α に、出力層のパターンを β に固定したときの s_i と s_j の相関関数を、学習データにおける同時確率 $P_0(I_\alpha \wedge O_\beta)$ で重み付き平均をとった値である。 p'_{ij} は、入力層のパターンを α に固定し、出力層と隠れ層とを開放したときの s_i と s_j の相関関数を、学習データにおいて入力層のパターンが α である確率 $P_0(I_\alpha)$ により重み付き平均をとった値である。相互想起型のボルツマンマシンでは、 p_{ij} は覚醒時の学習に、 p'_{ij} は睡眠時の反学習にたとえられている。

(IV.3.2-5)の重み係数 w_{ij} の学習則は、(IV.3.2-4)の $G(\{w_{ij}\})$ の1階微係数を用いているが、高階の微係数もニューロンの多体の相関関数で表すことができる。なぜならば、多体の相関関数の間には次の関係が成り立つからである。

$$\frac{\partial}{\partial w_{kl}} \langle s_1 \dots s_{2n} \rangle_{I_\alpha, O_\beta} = \frac{1}{T} \left(\langle s_1 \dots s_{2n} \cdot s_k s_l \rangle_{I_\alpha, O_\beta} - \langle s_1 \dots s_{2n} \rangle_{I_\alpha, O_\beta} \langle s_k s_l \rangle_{I_\alpha, O_\beta} \right) \quad (\text{IV.3.2-8})$$

$$\frac{\partial}{\partial w_{kl}} \langle s_1 \dots s_{2n} \rangle_{I_\alpha} = \frac{1}{T} \left(\langle s_1 \dots s_{2n} \cdot s_k s_l \rangle_{I_\alpha} - \langle s_1 \dots s_{2n} \rangle_{I_\alpha} \langle s_k s_l \rangle_{I_\alpha} \right) \quad (\text{IV.3.2-9})$$

このような高階微係数を利用することにより学習の速度を速めることや、極小解からの脱出する方法のヒントとなることが期待される。

また、(IV.3.2-5)による学習終了後に、逆に、出力層をパターン β に固定したときに入力層にパターン α が想起される確率 $P(I_\alpha | O_\beta)$ は、学習用データの $P_0(I_\alpha | O_\beta)$ とは

$$P(I_\alpha | O_\beta) = \frac{P(I_\alpha)}{P_0(I_\alpha)} \cdot \frac{P_0(O_\beta)}{P(O_\beta)} \cdot \frac{\Pi(O_\beta | I_\alpha)}{\Pi_0(O_\beta | I_\alpha)} P_0(I_\alpha | O_\beta) \quad (\text{IV.3.2-10})$$

という関係があり、一般には等しくない。しかし、(IV.3.2-10)の関係をを用いると、逆方向の想起確率分布 $P(I_\alpha | O_\beta)$ を計算により求めることができる。相互想起型のボルツマンマシンの実用的な応用例は、まだほとんど報告されていないようであるが、(IV.3.2-10)のような性質は相互想起型のボルツマンマシンの応用範囲を広げることに役立つと期待される。

次に、2層確率場モデルとの関係を述べる。2層確率場モデルの下層(V_{lower})をボルツマンマシンの入力層+隠れ層+出力層に対応させ、このうちの出力層を恒等写像によりコピーしたものを、2層確率場モデルの上層に対応させることができる。2層確率場モデルにおける下層の入力層のパターンを α に固定させたときに、上層にパターン β が想起される条件付き確率 $P(O_\beta | I_\alpha)$ を、(IV.3.1-3)の Π と考えれば、(IV.3.1-3)のカルバック情報量は、

$$G_2(I_\alpha) \equiv \sum_{\beta} \Pi_0(O_\beta | I_\alpha) \ln \left[\frac{\Pi_0(O_\beta | I_\alpha)}{\Pi(O_\beta | I_\alpha)} \right] \quad (\text{IV.3.2-11})$$

と書ける。さらに、

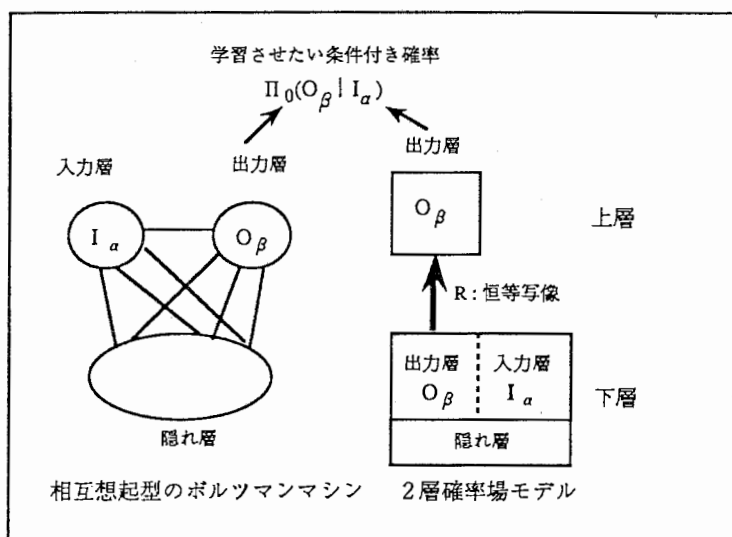
$$G \equiv \sum_{\alpha} P_0(I_{\alpha}) G_2(I_{\alpha}) \tag{IV.3.2-12}$$

とおけば、このGは相互想起型のボルツマンマシンのカルバック情報量(IV.3.2-4)と等価である。この場合、2層確率場モデルの更新ルールは、

$$\frac{dw_{ij}}{dt} = -\frac{\partial G}{\partial w_{ij}} = -\sum_{\alpha} P_0(I_{\alpha}) \frac{\partial G_2(I_{\alpha})}{\partial w_{ij}} \tag{IV.3.2-13}$$

$$= -\frac{1}{T} \sum_{\alpha} P_0(I_{\alpha}) \left[\sum_{\beta} \Pi_0(O_{\beta} | I_{\alpha}) \left\langle \left\{ \frac{P(O_{\beta} | V_{lower}, I_{\alpha})}{\langle P(O_{\beta} | V_{lower}, I_{\alpha}) \rangle} - 1 \right\} s_i s_j \right\rangle \right] \tag{IV.3.2-14}$$

と書き表すことができる。自己想起型のボルツマンマシンの場合と同様に、相互想起型のボルツマンマシンも2層確率場モデルと対応が付き、確率分布の学習が2層確率場モデルでも実現することが可能である。相互想起型のボルツマンマシンと2層確率場モデルとの対応を、図IV.3.2-2に示す。



図IV.3.2-2 相互想起型のボルツマンマシンと2層確率場モデル

自己想起型、相互想起型、いずれのボルツマンマシンによる確率分布の学習に対しても、同様な学習を2層確率場モデルにより実現することが可能である。学

習の評価規準として用いられるカルバック情報量も、ボルツマンマシンと同一の関数を用いることができ、パラメータの更新ルールもボルツマンマシンの場合と同様に、最急降下法である。ただし、ボルツマンマシンの場合と異なるのは、更新ルールの中味である。特に、相互想起型のボルツマンマシンでは、学習期と反学習期の2回、平衡状態でニューロン間の相関値の観測が必要であるが、2層確率場モデルの更新ルール(IV.3.2-14)では、1回の観測で済ますことができるという利点がある。今後は、具体例を通じて性能評価を行なっていく必要があるだろう。

IV.4 2層確率場モデルと組合わせ最適化問題

IV.4.1 数理計画問題の解法 -従来法-

一般に、最も適切な計画、設計、方策などを作成し、または選択することを最適化(optimization)と呼ぶ。最適化の問題は、制約条件や最適化の目的を(IV.4.1-1)のように関数や数式の形で表現することができ、一般に数理計画問題(mathematical programming problem)と呼ばれる。

$$\begin{cases} \min_x f(x) \\ \text{subject to } g_i(x) \leq 0, & (i = 1, \dots, m) \\ h_j(x) = 0, & (j = 1, \dots, l) \end{cases} \quad (\text{IV.4.1-1})$$

決定変数 (decision variable) x が、連続値であるか離散値であるかということや、目的関数(objective function)や制約条件(constraint)に用いられる関数($g_i(x)$ や $h_j(x)$)が1次関数であるかどうかという観点から、数理計画問題は図IV.4.1-1のように分類される[Ibaraki91]。図IV.4.1-1には、代表的な解法も記した[Nishikawa82]。

■ 連続的最適化問題-----決定変数 x が連続値をとる。

- 線形計画問題-----目的関数や制約条件が1次の等式・不等式で与えられる。

制約付き問題 → Lagrangeの未定乗数法、シンプレックス法、内点法

制約なし問題 → 最急降下法、Newton法、準Newton法、共役方向法

- 非線形計画問題-----目的関数や制約条件がすべて線形であるとは限らない。

制約付き問題 → Lagrangeの未定乗数法、変換法(ペナルティ関数法、乗数法)、射影法等。

制約なし問題 → 最急降下法、Newton法、準Newton法、共役方向法

- 2次計画問題---非線形計画問題の内、特に目的関数が2次で、制約条件が1次の等式・不等式である。

- 相補性問題-----ある種の等式・不等式系を満たす解を求める問題。

■ 組合わせ最適化問題(または、離散的最適化問題)-----決定変数 x が離散値をとる。

- 整数計画問題-----決定変数が整数であるという制約が課せられている線形計画問題。

→ 動的計画法、分枝限定法、近似的解法(欲張り法、反復改善法、ランダム法など)

図IV.4.1-1 数理計画問題の分類と代表的な解法

連続的最適化問題では、線形計画問題に関しては、シンプレックス法や最近注目を浴びている内点法による解法が極めて協力的であることが知られている。特に、内点法の中には多項式時間のアルゴリズム(i.e., 入力データ長の多項式オーダー時間で解くアルゴリズム)も知られている。現在では、数万から数十万の変数を持つ線形計画問題を実用的に解きうるまでになっている[Ibaraki93]。

非線形計画問題に関しては、制約条件のない場合には、線形計画問題と同様に、最急降下法、Newton法、準Newton法、共役方向法などの降下法(decendent method)に属する方法が用いられているが、目的関数が多峰性を持つときには、局所最適解(local optimal solution)しか得ることができない。制約条件のある問題に対しては、等式のみでの制約である場合には、Lagrangeの未定乗数法を用いることができる。しかし、この方法では非線形代数方程式を解かなければならず、大規模な問題に対しては適用の限界がある[Nishikawa82]。これに対して、不等式の制約条件が存在する場合にも、変換法と射影法は適用することが可能である。前者は、制約条件付き問題を制約のない問題の列に変換して逐次的にこれを解く方法であり、ペナルティ関数法(penalty function method)やその改良版である乗数法(multiplier method)が代表的な方法である。ペナルティ関数法は、適用範囲が広く、アルゴリズムが簡単であり、制約なし最適化の有効な方法が利用でき、乗数法はさらに、収束が比較的速く、大次元の問題にも適用可能とされているが、乗数の最良の更新法は未解決の問題として残されている[Konno78]。後者の射影法は、制約条件を直接利用する解法であり、勾配射影法(gradient projection method)や一般化簡約勾配法(generalized reduced gradient method)などが知られている。射影法は、目的関数の減少方向を活性な制約条件で作られる部分空間に射影することにより探索方向を決める方法であるが、制約の境界面への射影した方向を必要とするので、制約条件が線形の場合に特に有効である。

決定変数が離散値をとる最適化問題は、組合わせ最適化問題(combinatorial optimization problem)または、離散的最適化問題(discrete optimization problem)などと

呼ばれている。特に、決定変数が非負整数の線形計画問題は整数計画問題(integer programming problem)と呼ばれており、実用上の重要な組合わせ最適化問題の多くは、この整数計画問題に定式化できるとされている。

組合わせ最適化問題では、連続的最適化問題で用いたような、連続性や微分という概念にのっとった解析的な古典的手法を直接利用することは難しいので、列挙法的なアプローチが主として考案されてきた。この分野における代表的な手法として、動的計画法と分枝限定法とが挙げられる。動的計画法(dynamic programming)は、“最適性の原理”(principle of optimality), i.e., “最適方策では、中間の状態が何であっても、その中間状態を生じさせた最適方策の前半部分が、最初の状態からその中間状態を得る方策のうちで最適であるという性質”が成立している問題に適用される。ネットワークの最短経路を求める問題や、資源配分問題などに用いられている。

分枝限定法(branch-and-bound method)は、ほとんどすべての組合わせ最適化問題に適用できる計算原理であり、特に効率の良い解法が存在するような特殊な構造を持たない問題に対して、実用に耐えうる唯一のアプローチとなっている場合が少なくないとされている。分枝限定法の基本的な考え方は、問題をよりやさしい何個かの部分問題に分割し(分枝操作)、その部分問題の解決から原問題の最適解が得られないことが評価できる場合には、その部分問題を以後の考察から取り除く(限定操作)ということである。しかし、すべての整数計画問題を汎用のプログラムで扱うことには実際上無理があり、解くべき問題が持つ特殊構造を十分利用できるように工夫する必要がある。巡回セールスマン問題に関しては、分枝限定法と(整数)多面体アプローチを組み合わせた方法(分枝カット法)により、都市数が2000~3000の問題の厳密解が得られた例も報告されている[Ibaraki92]。

組合わせ最適化問題の近似解法としては、そのときの探索時点で最も最良と思われる方策を選んでいく欲張り法(greedy method)や、現在の近似解の近傍により良い解があれば置き換えるという反復改善法(iterative improvement, または局所探索法

local search)や、ランダムに可能解を発生させ目的関数最小のものを選択するランダム法(random method)、反復改善法と組み合わせたランダム多スタート局所探索法(random multi-start local search)などが考案されている。巡回セールスマン問題では、反復改善法的一种としてLin-Kernighanのアルゴリズム[Lin73]が有名である。これと遺伝的アルゴリズムを組み合わせた方法も提案されており、都市数が数十万という大規模な問題に対しても最適値からのずれが1~2%という近似解を得ることに成功した例も報告されている[Ibaraki92]。

上記以外の近似解法としては、遺伝子の進化をヒントに、交叉、突然変異、淘汰などに類似したプロセスを組み入れた確率アルゴリズムである、遺伝子アルゴリズム(genetic algorithm)[Goldberg89]や、反復改善法においてタブーリストを用いて探索のサイクリングを避けるタブー探索法(tabu search)などが、最近、考案されている。

IV.4.2 ニューロコンピューティングによる組合わせ最適化問題の解法

ニューラルネットワークモデルを用いた組合わせ最適化問題の解法としては、まず、Kirkpatrickら[Kirkpatrick83]がコンピューターのLSI回路の最適な配置を求める問題や、巡回セールスマン問題(Traveling Salesman Problem)を、統計物理学におけるスピン系(離散ニューロン系)のエネルギー最小状態を求める問題に帰着させ、さらに、模擬焼きなまし(Simulated Annealing)と呼ばれる方法で、最終的にシステムをエネルギー最小の状態に収束させることを提案した。彼らは、熱平衡状態に向けての状態遷移則としてメトロポリス法を用いたが、その代わりにヒート・バス法を用いたボルツマン・マシン[Ackley85]、それをさらに多値ニューロンに拡張したギブス・サンプラー[Geman84]などが提案され、組合わせ最適化問題のみならず、学習や画像処理等の問題にも応用されている。模擬焼きなまし(Simulated

Annealing)法の原理については、既にII.1で詳しく述べた。

しかしながら、こうした確率的な動作をするシステムでは、計算量の点で難がある。そこで、Hopfieldら[Hopfield85]は、決定論的な動作を行なうニューラルネットワークモデルを提案し、巡回セールスマン問題に適用した。彼らのモデルは、スピン系(離散ニューロン系)のシステムに平均場近似を施し、各温度でシステムの自由エネルギーを極小にする各スピンの熱平均値(アナログ量)をself-consistentな方程式の解として求めていることに相当する。これについても、既にII.2で詳述した。

上記の方法以外にも、巡回セールスマン問題に関しては、ニューラルネットの自己組織化を利用した弾性ネット(elastic net)モデルを用いた方法が提案されており、都市数の大きな場合にも有効であることが実験的にも示されている。しかしながら、この方法は巡回セールスマン問題向けの特種な解法であり、組合わせ最適化問題の一般的な解法とは言い難い。例えば、Durbin-Szeleski- Yuille らの方法 [Durbin89]では、エネルギー関数(目的関数)が定義できるので、収束性が保証されており、システムの性質も解析しやすくなっているが、そのエネルギー関数は、(IV.4.2-1)のように、都市の座標($\{X_i\}$)と弾性ネット上のノードの座標($\{Y_j\}$)とを陽に含んでしまっている。

$$E(\{Y_j\}; K) = -\alpha K \sum_i \log \left(\sum_j e^{-|X_i - Y_j|^2 / 2K^2} \right) + \beta \sum_j \{Y_j - Y_{j+1}\}^2 \quad (\text{IV.4.2-1})$$

したがって、弾性ネットモデルを用いた方法は、ニューロンの選び方などの定式化自体が、その問題の性質を十分に利用しているために、組合わせ最適化問題の解法としては、かえって一般性を失ってしまっている。同様に、ポッツスピンを用いて探索空間を狭める方法 [Peterson89]も、一般性という点で難がある。

解法の一般性という観点からは、Hopfieldら[Hopfield85]の定式化が自然であると言える。II.2でも述べたように、エネルギー関数は、最小にしたい量(巡回セール

スマン問題では経路の長さ)を表すコスト項と、可能解であることを要請する制約条件項とから成り立っており、エネルギー関数が書き下しやすい。こうした表現法は、数理計画法では”ペナルティ関数法”と呼ばれている(IV.4.1)。また、エネルギー関数は、0 から 1 の値を取るアナログニューロンで記述されており、組合わせ最適化問題のニューロコンピューティングによる定式化の方法として一般性がある。

IV.4.3 2 層確率場モデルによる組合わせ最適化問題の解法

一般的に、組み合わせ最適化問題のエネルギー関数として、次の形の関数を考える。

$$E(\omega_s; \{\theta_r\}) = E_{cond}(\omega_s; \{\theta_r\}) + E_{cost}(\omega_s) \quad (IV.4.3-1)$$

$(r = 1, \dots, n_\theta)$

上の式で、 ω_s は 2 層確率場モデル(IV.3.1)の下層の状態を表しており、離散値ニューロン(スピン)から構成されている。E は、2 層確率場モデルの下層のエネルギー関数に対応する。 E_{cond} の項は、 ω_s が満たすべき制約条件を記述しており、一般には複数の項からなる。ここでは、 E_{cond} の形として

$$E_{cond}(\omega_s; \{\theta_r\}) = \sum_{r=1}^{n_\theta} \theta_r \cdot \phi_r(\omega_s) \quad (IV.4.3-2)$$

であるものを選ぶ。ただし、 $\phi_r(\omega_s) \geq 0$ が成り立つものとし、 $\phi_r(\omega_s) = 0$ により ω_s が一つの制約条件を満たしていることを表わし、 $\phi_r(\omega_s)$ の値が大きいほどその制約条件が満たされていないものとする。 $\{\theta_r\} (r=1, \dots, n_\theta)$ は、(IV.4.3-2)の右辺の各項の重みを表わすパラメータである。 E_{cost} の項は、最小にしたいコストを表わしている。

状態 ω_s において、各制約条件 $\phi_r(\omega_s) = 0$ が満たされている度合いを、0.0~1.0 の実数値 $I_r(\omega_s) (r=1, \dots, n_\theta)$ で表わす。ただし、 $I_r(\omega_s) = 1.0$ は、制約条件が完全に

満たされていることを表わし、0.0に近づくほど満たしていないものとする。また、 $I_r(\omega_s)$ を要素とするベクトル $\{I_r(\omega_s)\}$ の1つの状態を ω_1 で表わし、すべての制約条件が満足された場合のベクトル $\{I_r(\omega_s)\}$ を、 ω_1^0 で表わす。 ω_1^0 は、各要素の値がすべて1.0のベクトルである。 ω_1 は、2層確率場モデルの上層に対応する。また、下層の状態 ω_s から、上層の状態 ω_1 への写像をRで表わすことにする。

ここで、ある写像Rの下で、次の関数 $\Pi(\omega_1; \{\theta_r\}, T)$ を定義する。

$$\Pi(\omega_1; \{\theta_r\}, T) \equiv \sum_{\omega_s} P(\omega_1 / \omega_s) P(\omega_s; \{\theta_r\}, T) \quad (\text{IV.4.3-3})$$

$$\left[P(\omega_1 / \omega_s) \equiv \begin{cases} 1 & \text{if } \omega_1 = R(\omega_s) \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \right] \quad (\text{IV.4.3-3'})$$

$P(\omega_s; \{\theta_r\}, T)$ は、(IV.4.3-1)のエネルギー関数を持つ離散値ニューロン系(スピン系)の、温度Tでの熱平衡状態における下層の状態 ω_s の出現確率を表わしている。 $\Pi(\omega_1; \{\theta_r\}, T)$ は、写像Rの下での上層の確率場 ω_1 の確率分布関数を与えている。ここで、 ω_1^0 の出現確率の値 $\Pi(\omega_1^0; \{\theta_r\}, T)$ は、下層のシステムの温度がT、エネルギー関数中のパラメーターの値が $\{\theta_r\}$ で、下層のシステムが熱平衡状態にあるときに、下層に出現する状態が制約条件を満足しているかどうかという量 $P(\omega_1^0 / \omega_s)$ (0または1)の時間平均値を表わしており、“制約条件満足度”と定義する。 $\Pi(\omega_1^0; \{\theta_r\}, T)$ は、0から1のアナログ値を取り、完全に制約条件を満たしている状態(実行可能解)だけが出現するときには、1となる。

ただし、実際の計算では、 $P(\omega_1^0 / \omega_s)$ を、

$$P(\omega_1^0 / \omega_s) \equiv f(\omega_1^0, R(\omega_s)) \quad (\text{IV.4.3-4})$$

というアナログ量で置き換える。 $f(\omega_1^0, R(\omega_s))$ は、2つのベクトル、 ω_1^0 と $R(\omega_s)$ との類似の度合いを0~1.0の実数で表わしている関数である。(IV.4.3-4)の置き換えは、現在の下層の状態 ω_s が、どの程度制約条件を満たしているかという度合いを、よりきめ細かく評価しようという考えに基づいている。

制約条件満足度 $\Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T)$ は、 $\{\theta_r\}$ が大きければ1に近づき、逆に、小さければ0に近づくので、 $\{\theta_r\}$ の値を制御するための目安として用いることにする。まず、 Π に対して、各温度で目標値を定め、 $\Pi_0(T)$ で表わす。さらに、この目標値 $\Pi_0(T)$ と実際に観測される $\Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T)$ の値との誤差を、

$$U_{err}(\{\theta_r\}, T) \equiv \frac{1}{2} \left\{ \Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T) - \Pi_0(T) \right\}^2 \quad (\text{IV.4.3-5})$$

で定義する。温度 T において、この誤差を減少させるようなパラメータの更新ルールを、最急降下法を用いて導出する。まず、(IV.4.3-5)より、

$$\frac{d\theta_r}{dt} = - \frac{\partial U_{err}}{\partial \theta_r} \quad (\text{IV.4.3-6})$$

$$= - \left\{ \Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T) - \Pi_0(T) \right\} \frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r} \quad (\text{IV.4.3-7})$$

を得る。熱平衡状態では、

$$P(\omega_s; \{\theta_r\}, T) = \frac{e^{-E(\omega_s; \{\theta_r\})/T}}{\sum_{\omega_s} e^{-E(\omega_s; \{\theta_r\})/T}} \quad (\text{IV.4.3-8})$$

が成り立っているので、(IV.4.3-3)と(IV.4.3-8)とから $\frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r}$ を計算し、(IV.4.3-7)に代入すると、次の更新ルールが得られる。

$$\frac{d\theta_r}{dt} = \frac{1}{T} \left\{ \Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T) - \Pi_0(T) \right\} \cdot \left\langle \left\{ P(\omega_i^0/\omega_s) - \Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T) \right\} \cdot \frac{\partial E}{\partial \theta_r} \right\rangle \quad (\text{IV.4.3-9})$$

$\langle \rangle$ は、 $\sum_{\omega_s} P(\omega_s; \{\theta_r\}, T)$ の意味で、熱平衡状態では $\langle \rangle$ 内の量の時間平均と等価である。ただし、実際の計算では、(IV.4.3-9)中 $P(\omega_i^0/\omega_s)$ のとして(IV.4.3-4)を用いる。^{注)}

次に、制約条件満足度の目標値 $\Pi_0(T)$ の設定方法について述べる。まず、アニー

リングの開始温度 T_{start} では、パラメーター θ_r の値をすべて0にセットする。すると、制約条件の項がなくなるので、制約条件満足度 $\Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T)$ の値は小さく、0に近くなる。しかし、アニーリングの最終段階では、制約条件を完全に満足する状態にシステムが収束するのが望ましいので、低温になるにつれて、 $\Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T)$ の値は1.0に近づくのが理想的である。

そこで、制約条件満足度の目標値 $\Pi_0(T)$ として、図IV.4.3-1の様な折れ線の形状をしたものをここでは選ぶことにした。さらに、図中の、 T_{start} 、 T_{max} 、 T_{min} は、理想的な値を理論的に導き出すのは難しいので、おおよそのオーダーを見積ることとし、以下のように選ぶことにする。

$$T_{start} \equiv \max_{\omega_s \in \Omega_0} \max_k |\Delta E_k(\omega_s; \{\theta_r = 0\})| \quad (IV.4.3-10)$$

$$T_{max} \equiv \text{avr}_{\omega_s \in \Omega_0} \text{avr}_k |\Delta E_k(\omega_s; \{\theta_r = 0\})| \quad (IV.4.3-11)$$

$$T_{min} \equiv \frac{1}{2} \min_{\omega_s \in \Omega_0} \min_k |\Delta E_k(\omega_s; \{\theta_r\})| \quad (IV.4.3-12)$$

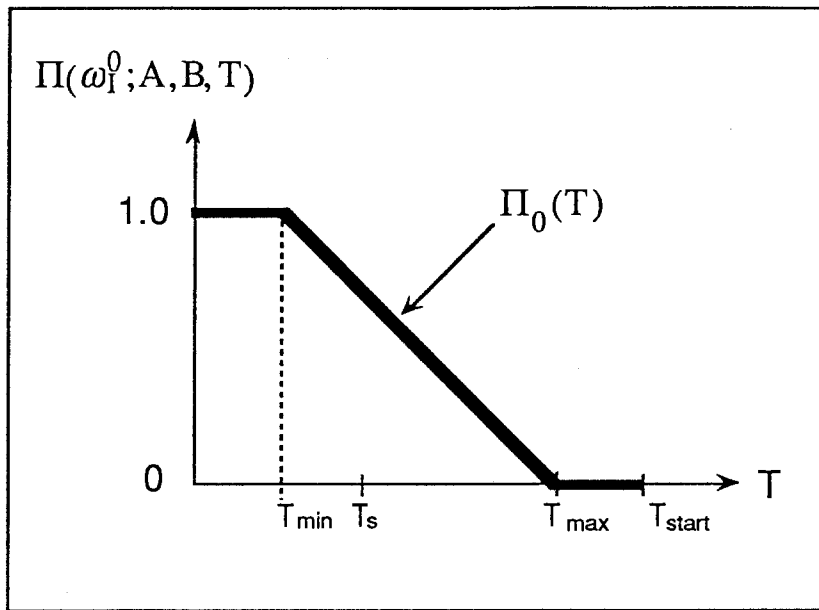
ここで、 Ω_0 は、下層の状態 ω_s がとりうる状態空間 Ω の中で、制約条件を満たしているすべての状態(可能解)が作る部分空間であり、 $\Delta E_k(\omega_s; \{\theta_r\})$ は、状態 ω_s からある1つの離散値ニューロン(スピン) s_k が状態を変化させたときに生ずるエネルギー変化量である。avrは、平均操作を表わす。実用的には、(IV.4.3-10)~(IV.4.3-12)の右辺の量は、何らかの近似で、 E_{cost} だけから容易に計算できるようにしておくことが望ましい。

注) 条件付き確率として(IV.4.3-3)のような2値の関数を用いると、常に $\frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r} \geq 0$ が成り立つ。

(∴)

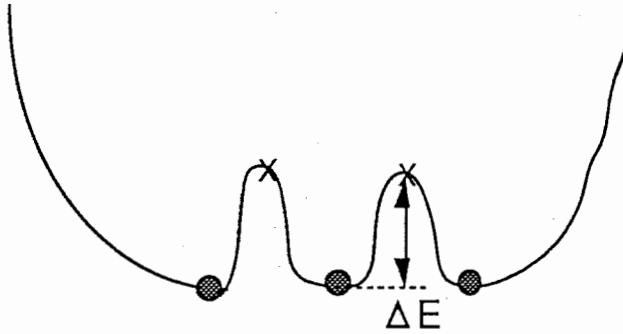
$$\begin{cases} \omega_i^0 = R(\omega_s) \rightarrow \phi_r(\omega_s) = 0 \\ \omega_i^0 \neq R(\omega_s) \rightarrow P(\omega_i^0/\omega_s) = 0 \end{cases} \quad \text{より、常に } P(\omega_i^0/\omega_s) \frac{\partial E}{\partial \theta_r} = 0 \text{ である。したがって、}$$

$$\frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r} = -\frac{1}{T} \left\langle \left\{ P(\omega_i^0/\omega_s) - \Pi(\omega_i^0) \right\} \frac{\partial E}{\partial \theta_r} \right\rangle = \frac{1}{T} \Pi(\omega_i^0) \langle \phi_r(\omega_s) \rangle \geq 0 \text{ が成り立つ。}$$

図IV.4.3-1 制約条件満足度の目標値 $\Pi_0(T)$.

次に、(IV.4.3-10)～(IV.4.3-12)の意味について述べる。シミュレーテッド・アニーリングにおいては、システムの状態遷移に、通常、1ニューロンごとの試行変形を用いることが多い。しかし、多くのエネルギー関数の場合、制約条件を満足している状態間の直接遷移が起きない様になっている(例えば、Hopfield and Tankが巡回セールスマン問題に用いたエネルギー関数)。従って、もし、 θ_i の値が大きすぎると、制約条件を満たさず状態(極小値)にトラップされやすくなり、コスト値の大きな解しか得られないことが多い。そこで、制約条件を満たしている状態から、1つのニューロンを変化させると、制約条件を満たさない状態になる場合を考える。状態遷移にメトロポリス法を用いる場合でも、ヒート・バス法を用いる場合でも、1つのニューロンが状態変化する確率は、 $(\Delta E; \text{エネルギー変化量})$ の値を計算することにより与えられる。このときのエネルギー障壁 ΔE の大きさに注目する(図IV.4.3-2参照)。 T_{start} は、システムが Ω_0 に属する状態(可能解)であるときに、1つのニューロンの状態変化に対するエネルギー障壁を、容易に乗り越えられるだけの十分高い温度であり、 T_{max} は、システムが Ω_0 に属する状態(可能解)であるときに、平均的なエネルギー障壁を乗り越えて、制約条件を満たさない状態に遷移することができずに、そのままの状態(可能解)に留まることが起こり始める程度

の温度である。また、システムが Ω_0 に属する状態(可能解)であるときに、エネルギー障壁の最小値の半分程度の低い温度ならば、制約条件を満たさない状態に移せずに、ほとんど確実にその状態(可能解)に留まるので、 T_{\min} は、 $\Pi(\omega_i^0; \{\theta_i\}, T)$ の値が1.0となるのに十分低い温度であると考えられる。



$\left[\begin{array}{l} \bullet ; \omega_s \in \Omega_0 (\text{feasible solution}) \\ \times ; \omega_s \notin \Omega_0 \end{array} \right]$

図IV.4.3-2 エネルギー障壁.

本節で提案している手法は、熱平衡状態を保ちながら温度を下げるというアニーリングの操作と、一定温度で(IV.4.3-9)によるパラメータ値の更新という操作を、交互に繰り返すことにより、システムが低温になるにつれて制約条件を満足する解に徐々に収束していくことを狙いとしている。しかし、実際には、アニーリング速度が速すぎるなどの理由から、たとえパラメーターの値が適切であっても、システムは制約条件を満足する最低コスト解に収束するとは限らない。そこで、現実的な探索法として、ある温度 T_s ($T_{\min} \leq T_s \leq T_{\max}$) 以下では、システムの状態をモニターし、出現した可能解の中で、最もコスト値が小さい状態を選び出すという処理を加えることにする。

従って、組合わせ最適化問題のための、2層確率場モデルを用いた本手法の処理フローは、次のようにまとめられる。

【処理フロー】

step1: アニーリング温度列 $\{T_i\}$ ($i=0, \dots, n: T_0=T_{\text{start}}, T_{\text{start}}, T_{\text{max}}, T_{\text{min}}, T_s$)の値を設定する。

step2: $\theta_r=0$ ($r=1, \dots, n_\theta$), $T=T_0$ とする。

step3: システムを熱平衡状態に到達させる。

step4: (IV.4.3-9)の右辺の量を観測し、 $\{\theta_r\}$ の値を更新する。

if $T \leq T_s$ then

観測中に出現した可能解の中で、最低コストの解を記録しておく。

endif

step5: step3 とstep4 を $\{\theta_r\}$ の更新量が0になるまで、十分な回数だけ繰り返す。

(ただし、繰り返し回数の上限は設定しておく)

step6: $i \leftarrow i+1$, $T \leftarrow T_i$ とする。

step7: if $i \leq n$ then step3へ戻る。

step8: step4で記録された解と、アニーリング終了時にシステムが収束した先の状態とを比べて、より望ましい方の解を最終結果とする。

[処理終了]

第 V 章 2 層確率場モデルの検証と応用

本章(第 V 章)では、2 層確率場モデルの検証と実際の問題への応用をかねて、画像処理の分野では、エッジ情報を用いた画像修復の問題(V.1)[Igarashi92,94]と、コーナーなどの特徴点の情報を用いたエッジ修復の問題(V.2)を取り上げ[Igarashi93-2]、組み合わせ最適化問題の分野では、巡回セールスマン問題(V.3)を取り上げた[Igarashi92-2]。巡回セールスマン問題では、さらに、2 層確率場モデルに平均場近似を施すことも試みた(V.4)[Igarashi93]。

画像修復の問題と平均場近似を用いた巡回セールスマン問題の解法においては、ニューロンの動作などの処理を並列化することにより、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)を用いることが可能となった。これらの応用問題における実験を通して、パラメータ更新ルールの正当性が検証され、逆問題の解法と最適解の探索に 2 層確率場モデルが有効であることを示す。

さらに、上記以外の問題への応用として、両眼立体視における奥行き知覚の計算モデルとしての可能性(V.5.1)と、巡回セールスマン問題よりはるかに複雑である配送問題への応用を検討した(V.5.2)。前者の問題への応用を検討することは、脳における視覚情報処理の計算モデルとしての 2 層確率場モデルの可能性を探るものである。後者の問題は、多目的最適化問題の一例として、きわめて現実的で実用性の高い例題である。

V.1 エッジ情報を用いた画像修復への応用

V.1.1 背景

IV.2.1で述べたように、一般に、生体における初期視覚[Poggio85]の問題におい

でも、工学のコンピュータビジョンの分野においても、対象物体の状態(S)をある限られた間接的な観測データ(I)だけから推定することが必要となってくる。例えば、網膜ないしはフィルム上に投影された1枚または数枚の2次元画像から3次元可視表面を再構成するというような問題である。また、観測データだけでなく、トップダウン的に得られた情報(または仮説)を拘束条件(I')として内部モデル(S')を再構成することも同様な問題と考えられる。例えば、濃度に関する観測データの他にエッジ情報を与えて濃度情報を充填する問題(filling-in)などである。これらの問題は、 $I=RS$ (または $I'=R'S'$)の逆問題と定式化される。ただし、 $R(R')$ は、 $S(S')$ から $I(I')$ への写像で一般には非線形な写像である。

V.1では、この”filling-in”の問題を取り上げる。この問題は、IV.2.2で述べたように、結合MRFモデルを用いた方法が試みられている[Hongo92]。しかし、結合MRFモデルでは、2つの確率場がエネルギー的に強く結合しており、そのままの形で視覚大脳皮質に見られる視覚情報処理の階層構造[Kawato90]を構築することには難がある。特に、独立変数の個数が多くなるので大局的な最適解を得るには、計算量の点で問題があるので、決定論的なモデルによりエネルギー関数の極小状態をもとめることになる。その場合には、エネルギー関数(IV.2.2-1)中の重み係数 λ や γ の値をどのように定めるかという問題が生じる。

また、”filling-in”の問題は、視覚情報処理としての問題であるだけでなく、工学的な観点からも、エッジ情報を利用した画像修復法への応用や、エッジ情報と疎な画素の濃淡値だけを送信し、受信側で”filling-in”によりこれを再生するというような、画像通信のためのデータ圧縮方法への応用などが考えられる。次節以下では、前者のエッジ情報を利用した画像修復法への応用について考える。

V.1.2 エネルギー関数

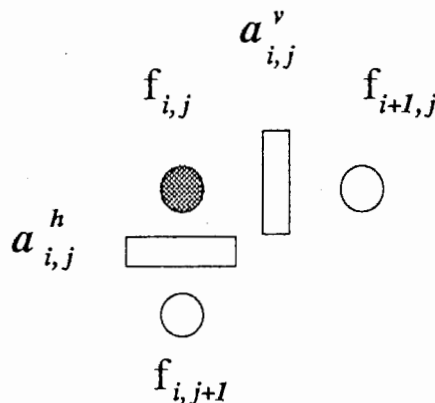
IV.3.1で述べた2層確率場モデルを、各格子点ごとにランダムなノイズが加わっ

た2次元濃淡画像の修復問題に適用する。ここでは、原画像(S')に関する、ある既知の非線形なエッジ抽出処理 R_h により得られたエッジ情報を制約条件(I')として与えているので、エッジ情報から原画像を推定する非線形逆問題と見なすことができる。すなわち、 $I'=R_h S'$ において、I'を与えてS'を求める非線形逆問題と定式化される。

既に、確率場という考えを用いて、強度過程(画素)と線過程(エッジ)とが結合したMRFモデルを用いて観測画像から事後確率が最大となるように原画像を推定する試みがGemanらにより行なわれている[Geman84]。ここでは、強度過程を図IV.3.1-2の確率場X、線過程を確率場X'とする。ただし、2つの確率場はエネルギー的に結合はなく、代わりに図V.1.2-1の様に、線過程の格子点上に画素強度の不連続性を表すパラメータ $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$ ($0 \leq a_{ij}^v \leq 1, 0 \leq a_{ij}^h \leq 1$)を考えて、強度過程上のエネルギー関数を

$$E(\{f_{i,j}\}) \equiv \sum_{i,j} \left[(f_{i+1,j} - f_{i,j})^2 (1 - a_{i,j}^v) + (f_{i,j+1} - f_{i,j})^2 (1 - a_{i,j}^h) \right] + \sum_{i,j} b_{i,j} (f_{i,j} - f_{i,j}^{obs})^2 \quad (V.1.2-1)$$

で定義する。



図V.1.2-1 強度過程 $\{f_{i,j}\}$ と、線過程上に定義された画素強度の不連続性を表す

パラメータ $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$.

(V.1.2-1)の第1項は画像強度の滑らかさ(滑らか拘束条件)を要請しているが、不連続性を表すパラメータ $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$ が十分に1に近いところでは滑らか拘束条件は無効になる。第2項は、観測画像 $\{f_{ij}^{obs}\}$ との近さを表現しているデータフィッティング項である。パラメータ $\{b_{ij}\} (b_{ij} \geq 0)$ は、各点での観測データの信頼性を表していると解釈できる。また、画像修復問題を(V.1.2-1)の形のエネルギー関数の最小化問題に帰着させるには、Gemanら[Geman84]のようにBayesの定理によるMAP推定(maximum a posteriori estimation, 最大事後確率推定)の枠組みを用いても導出することができる。MAP推定の枠組みでは、

$$P(\{f_{i,j}\} | \{l'_{i,j}\}, \{f_{i,j}^{obs}\}) \propto P(\{l'_{i,j}\}, \{f_{i,j}^{obs}\} | \{f_{i,j}\}) \cdot P(\{f_{i,j}\}) \quad (V.1.2-2)$$

$$= P(\{l'_{i,j}\} | \{f_{i,j}\}) \cdot P(\{f_{i,j}^{obs}\} | \{f_{i,j}\}) \cdot P(\{f_{i,j}\}) \quad (V.1.2-3)$$

を最大にする画像 $\{f_{i,j}\}$ を推定する。ただし、 $\{l'_{i,j}\}$ は原画像にエッジ抽出処理 R_{edge} を施して得られた線過程上での正しいエッジの状態である。(V.1.2-1)と(V.1.2-3)とを比較すると、(V.1.2-1)の第1項は、原画像に関する事前知識 $P(\{f_{i,j}\})$ にあたり、(V.1.2-1)の第2項は、推定画像 $\{f_{i,j}\}$ を与えたときに観測画像 $\{f_{i,j}^{obs}\}$ が観測される条件付き確率 $P(\{f_{i,j}^{obs}\} | \{f_{i,j}\})$ から導かれる。このとき、第2項が観測画像と推定画像の2乗誤差で表されることは、観測画像を作成する際に原画像に加えられたノイズとして、ガウシアンノイズを仮定すれば導くことができる[Geman84]。また、 $G = -\ln \Pi(\{l'_{i,j}\}) = -\ln \langle P(\{l'_{i,j}\} | \{f_{i,j}\}) \rangle$ からわかるように、(V.1.2-3)の $P(\{l'_{i,j}\} | \{f_{i,j}\})$ は、(IV.3.1-3)のカルバック情報量 G に対応しており、(V.1.2-1)のエネルギー関数 E で用いられているパラメータ $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}, \{b_{ij}\}$ の値を適切な値に調節するための規準として用いられる。したがって、本節で提案する画像修復法は、シミュレーテッド・アニーリングによるエネルギー関数 E の最小化により、(V.1.2-3)の $P(\{f_{i,j}^{obs}\} | \{f_{i,j}\})P(\{f_{i,j}\})$ を最大化し、さらにそのエネルギー関数中のパラメータの値を調節することにより(IV.3.1-3)のカルバック情報量 G を減少させ、(V.1.2-3)の $P(\{l'_{i,j}\} |$

$\{f_{ij}\}$ を増加させていることがわかる。これは事後確率 $P(\{f_{ij}\} | \{I'_{ij}\}, \{f_{ij}^{obs}\})$ の最大化というMAP推定の本来の目的と合致している。

また、Gemanら[Geman84]の結合MRFモデルを用いた取り扱いでは、画素強度だけでなくエッジも独立変数と考え、エッジに関する事前知識(または制約条件)として、エッジの組み合わせ易さを局所的なポテンシャルの形でエネルギー関数中に表現していたが、今回は、その代わりに正しいエッジを、線過程上での一つの状態として直接与えている点が大きく異なっている。もし、結合MRFモデルを用いて、正しいエッジの形を直接利用しようとするれば、エッジの組み合わせ易さを表現したポテンシャル項を取り除き、線過程の状態を正しいエッジ状態に固定して、強度過程だけを独立変数としてエネルギー関数の最小化を図るという方法が考えられる。これは、本モデルでは、(V.1.2-1)で画素強度の不連続性を表したパラメータ $\{a^v_{ij}\}, \{a^h_{ij}\}$ を望ましいエッジ状態に合わせて0または1に固定した場合に相当する。本章(V)は、前章(IV.3.1)で述べたパラメータの更新ルールの検証を目的の一つとしているので、 $\{a^v_{ij}\}, \{a^h_{ij}\}$ をフリーパラメータとした場合でも、適切な値に調節できるかどうかを試すことにする。フリーパラメータの個数が多いほうが、パラメータ推定の問題としてはより難しく、パラメータ更新ルールの検証する例題として適していると考えられるからである。

なお、視覚情報処理の研究においては、通常、(IV.2.1-1)のように、 I は2次元画像強度などの低次レベルの情報を表し、 S はエッジや特徴点などの高次レベルの情報を表し、低次レベルの情報(I)を与えて高次レベルの情報(S)を推定するという、 $I=RS$ の逆問題(R は光学)として定式化するのが普通である。しかし、ここでは正しいエッジ状態を与えて原画像を推定するという問題なので、これを $I'=R'S'$ の逆問題(ただし $R'=R_{\oplus}$)として定式化すると、通常とは逆に、 I' が高次レベルの情報(エッジ)を S' が低次レベルの情報(画像強度)を表している。

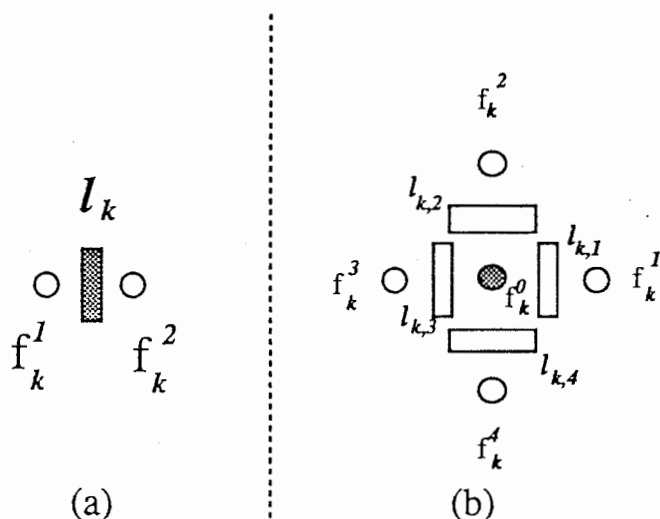
V.1.3 並列処理化されたパラメータ更新ルール

この問題では、線過程上での理想的なただ一つの状態 $\omega'_0 = \{l'\}$ がわかっている。また、エッジ抽出のための閾値処理も局所的な処理であるので、遠距離にある画素変数間の時間的な相関を平均場近似的な考え方に基づいて近似すると、(IV.3.1-5)のパラメータの更新ルールは、次のように、パラメータの近傍の強度過程の状態だけを用いて表現できる。

$$\frac{\partial a_k}{\partial t} \approx -\frac{1}{T} \left\langle \left[\frac{P(l'_k \{f_k^1, f_k^2\})}{\langle P(l'_k \{f_k^1, f_k^2\}) \rangle} - 1 \right] \cdot \frac{\partial E}{\partial a_k} \right\rangle \quad (\text{V.1.3-1})$$

$$\frac{\partial b_k}{\partial t} \approx -\frac{1}{T} \left\langle \left[\frac{P(\{l'_{k,1}, l'_{k,2}, l'_{k,3}, l'_{k,4}\} \{f_k^0, f_k^1, f_k^2, f_k^3, f_k^4\})}{\langle P(\{l'_{k,1}, l'_{k,2}, l'_{k,3}, l'_{k,4}\} \{f_k^0, f_k^1, f_k^2, f_k^3, f_k^4\}) \rangle} - 1 \right] \cdot \frac{\partial E}{\partial b_k} \right\rangle \quad (\text{V.1.3-2})$$

(V.1.3-1), (V.1.3-2)の導出方法は付録Cに示してある。(V.1.3-1)と(V.1.3-2)の右辺の計算に必要な強度過程の状態変数を、図V.1.3-1の(a),(b)にそれぞれ示した。図V.1.3-1の(a)では、パラメータ a_k として $\{a_{ij}^v\}$ の一つを選んでいるが、 $\{a_{ij}^h\}$ の場合は、 a_{ij}^h の上下の画素を考えればよい。



図V.1.3-1 更新ルールの計算に必要な変数

(V.1.3-1)では、パラメータ a_k が定義されたエッジ格子点上での線過程の状態 $l_k = R_n(f_k^1, f_k^2; D)$ が、その点における理想的なエッジ情報 l'_k と一致すれば1、そうでなければ0を与える2値関数 $P(l'_k | \{f_k^1, f_k^2\})$ が用いられている。同様に、(V.1.3-2)は、パラメータ b_k が定義されている格子点の周囲の線過程の状態 $(l_{k,1}, l_{k,2}, l_{k,3}, l_{k,4})$ が、理想的なエッジ情報 $(l'_{k,1}, l'_{k,2}, l'_{k,3}, l'_{k,4})$ と完全に一致していれば1、そうでなければ0になる2値関数 $P(\{l'_{k,1}, l'_{k,2}, l'_{k,3}, l'_{k,4}\} | \{f_k^0, f_k^1, f_k^2, f_k^3, f_k^4\})$ を用いて計算できる。また、 $\langle \rangle$ は、熱平衡状態での時間平均操作を表している。

V.1.4 全体の処理の流れ

全体の処理の流れを以下に示す。

[全体の処理の流れ]

- step1: アニーリング温度列 $\{T_i\} (i=0, \dots, n)$ を設定。
- step2: $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}, \{b_{ij}\}$ と温度 T を初期値に設定。
- step3: システムを熱平衡状態に到達させる。
- step4: (V.1.3-1), (V.1.3-2)の右辺の量を観測し、 $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}, \{b_{ij}\}$ の値を更新する。
- step5: step3とstep4を $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}, \{b_{ij}\}$ の更新量が0になるまで、十分な回数だけ繰り返す。
- step6: $i \leftarrow i+1, T \leftarrow T_i$ とする。
- step7: if $i \leq n$ then step3へ戻る。
- step8: 処理終了。

V.1.5 実験

V.1.5.1 画像データとエッジ情報

原画像として、8階調 ($f_{ij}=0,1,\dots,7$)で、サイズが 128×64 の図V.1.5.1-1(a)(次ページ参照)のような画像を考える。図V.1.5.1-1(a)では、左に内部の画素値が5である正方形の領域があり、右に内部の画素値が3である円の領域がある。それらの外部の画素値は0である。これに適当なランダムなノイズを加えた画像 $\{f_{ij}^{obs}\}$ が図V.1.5.1-1(b)である。図V.1.5.1-1(b)では、わかりにくいですが、正方形と円の外部の領域にもノイズが加えられている。さらに、4近傍で隣接する画素との強度差が閾値D以上である場合には、対応する線過程でエッジを立てるという操作 R_{edge} を強度過程から線過程への写像として採用する。このエッジ抽出の写像 R_{edge} の下で、観測画像(b)と厳密なエッジ情報とから原画像を推定することを試みる。今回は、原画像に対して $D=0.5$ という閾値を持つ閾値処理により得られたエッジ画像を採用した。すなわち、隣接した画素と画素値が異なる場合には、すべてエッジを立て、原画像に関する厳密なエッジ情報とした。

V.1.5.2 熱平衡状態の生成

実験には、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)を使用した。1画素に1CPUを割り当てた。V.1.4のstep3における強度過程での熱平衡状態を実現するために、Gemanらの"Gibbsサンプラー"[Geman84]を用いた。すなわち、

$$P(f_{i,j}) = \frac{e^{-E(f_{i,j})/T}}{\sum_{f_{i,j}=0}^7 e^{-E(f_{i,j})/T}} \quad (\text{V.1.5.2-1})$$

で表される確率に従って各画素値 $f_{i,j}$ の状態更新を行なった。ただし、(V.1.5.2-1)で

スケール

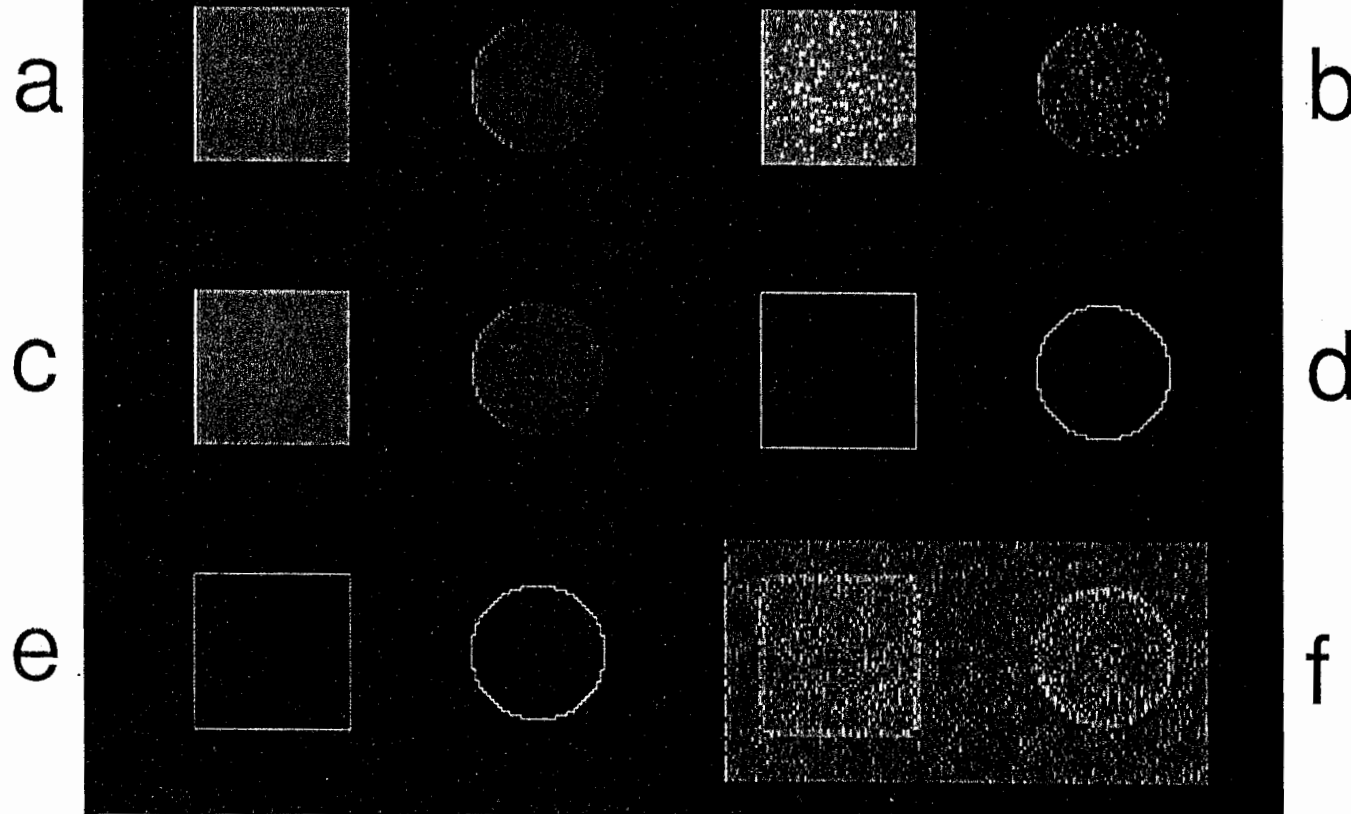


図 V.1.5.1-1 画像修復の実験結果：(a)原画像, (b)観測画像, (c)修復画像, (d)修復画像の線過程, (e) $\{a^v_{ij}\}$ と $\{a^h_{ij}\}$ の最終値, (f) $\{b_{ij}\}$ の最終値。

注) 図中では、白い(明るい)ほど値は大きいことを意味している。左上のグレースケールの範囲は、(a)~(c)では0から7、(d)(e)では0から1.0、(f)では0から5.0である。

Fig. V.1.5.1-1 Results of image restoration: (a)original image, (b)observed image, (c)restored image, (d)line process of the restored image, (e)final values of $\{a^v_{ij}\}$ and $\{a^h_{ij}\}$, (f)final values of $\{b_{ij}\}$.

は、 $f_{i,j}$ 以外の画素変数は、そのときの状態に固定して $P(f_{i,j})$ の値を計算している。(V.1.2-1)で示されたエネルギー関数では、1つの画素と直接結合しているのは、前後左右の最近接の画素に限られる。従って、全画素を市松模様状に2つのクラスに分けて(coloring)、交互に各クラスごとに一齐に状態更新を行なっても、各画素を非同期に(V.1.5.2-1)の確率に従って状態更新を行なったことと等価であると考えられる。

V.1.5.3 実験条件

V.1.4で示した全体の処理の流れにおける諸条件について述べる。step1でのアニーリング温度列 $\{T_i\}$ ($i=0, \dots, n:n=7$)とエッジ抽出のための閾値 $\{D_i\}$ ($i=0, \dots, n:n=7$)は、 $\{(T_i, D_i)\} = \{(2.0, 4.5), (2.0, 2.5), (2.0, 1.5), (1.5, 0.5), (1.0, 0.5), (0.6, 0.5), (0.2, 0.5), (0.05, 0.5)\}$ と設定した。閾値Dを大きい値(4.5)から小さい値(0.5)へ徐々に下げていくのは以下の考えに基づいている。まず最初に凹凸の大きな強い不連続性を持ったエッジの形を厳密なエッジ情報と一致させ、次に、観測画像中に存在していたノイズや熱揺らぎにより生ずる細かな凸凹を、次第に閾値を下げながら徐々に取り去れば、厳密なエッジの形に一致させるための処理時間を短縮することができると考えられるからである。

step2でのパラメータの初期値は、 $\{a_{i,j}^v\}$ と $\{a_{i,j}^h\}$ とは、すべて一律に0.5とした。 $\{b_{i,j}\}$ も一律に2.0という値に初期設定した。2.0という値は、観測画像を信頼するという観点からは、かなり大きな値で、実際、上記の初期値にパラメータを固定して、アニーリングを行なうと、図V.1.5.1-1(b)の観測画像 $\{f_{i,j}^{obs}\}$ と同様なかなりのノイズが入った画像に収束してしまう。

step3での、Gibbs サンプラーによる熱平衡状態の生成過程において、すべての画素変数 $\{f_{i,j}\}$ が1回だけ状態更新を試みることを1回のスキャンと称する。本実験では、10回のスキャンで体系が熱平衡状態に達したと判定して、それ以上の状

態更新を打ち切っている。

step4における、(V.1.3-1), (V.1.3-2)の右辺の時間平均操作は、step3と同じく、10回分のスキャンで得られた状態を蓄積しておき、そのデータから各量の時間平均値を計算した。各パラメータの値の更新は一斉に行なうこととし、各温度ステップで5回ずつ行なった(step5)。

V.1.5.4 実験結果と考察

図V.1.5.1-1(c),(d)に最終的に得られた修復画像と線過程の状態を示した。図V.1.5.1-1では、白い(明るい)ほど値が大きいことを表している。図V.1.5.1-1の左上に示したグレースケールの範囲は、(a)~(c)では、0から7、(d)(e)では0から1.0、(f)では0から5.0である。最終的に得られた修復画像(図V.1.5.1-1(c))と線過程の状態(図V.1.5.1-1(d))は、それぞれ、原画像(図V.1.5.1-1(a))と最初に与えた厳密なエッジ情報と一致しており、完全な修復結果を得ることができた。

次に、パラメータ $\{a_{ij}^v\}$, $\{a_{ij}^h\}$ と $\{b_{ij}\}$ の最終的な値を図V.1.5.1-1(e),(f)に示す。さらに、これらの具体的な値を4つの領域に分けて、表V.1.5.4-1と表V.1.5.4-2にそれぞれ示した。表V.1.5.4-1では、 $\{a_{ij}^v\}$ と $\{a_{ij}^h\}$ の定義されている線過程上の格子点を、原画像においてエッジが抽出された領域($D=0.5$)かどうかという観点と、観測画像 $\{f_{ij}^{obs}\}$ においてエッジが抽出された領域($D=0.5$)かどうかという観点とから、4つの領域に分けて、各領域内で、 $\{a_{ij}^v\}$ と $\{a_{ij}^h\}$ の最終値の平均値を計算してある。また、表V.1.5.4-2では、強度過程上の格子点を、原画像において抽出されたエッジに図V.1.3-1(a)の様に隣接しているかどうかという観点と、原画像と観測画像 $\{f_{ij}^{obs}\}$ とで画素値が異なる領域(ノイズで汚された領域)かどうかという観点から、4つの領域に分けて、各領域内で、 $\{b_{ij}\}$ の値の最終値の平均値を計算してある。なお、 $\{a_{ij}^v\}$ と $\{a_{ij}^h\}$ の初期値は0.5であり、 $\{b_{ij}\}$ の初期値は2.0である。

		観測画像でエッジが抽出された領域か？	
		Yes	No
原画像でエッジが抽出された領域か？	Yes	(A) 0.9977	(C) ---
	No	(B) 0.0000	(D) 0.0964

表V.1.5.4-1 $\{a_{ij}^h\}$ と $\{a_{ij}^v\}$ の最終的な値の平均値.

注) $\{a_{ij}^h\}$ と $\{a_{ij}^v\}$ の初期値は0.5であり、—は、該当する領域に属するデータが存在しなかったことを表している。

		原画像と観測画像で値が異なる領域か？	
		Yes	No
原画像のエッジに隣接する領域か？	Yes	(A) 0.2896	(C) 2.803
	No	(B) 0.7587	(D) 2.271

表V.1.5.4-2 $\{b_{ij}\}$ の最終的な値の平均値.

注) $\{b_{ij}\}$ の初期値は2.0である。

図V.1.5.1-1(e)と表V.1.5.4-1から、原画像において、画素強度が不連続に変化している図形の輪郭線上(表V.1.5.4-1(A),(C))では、 $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$ の値が1に近くなり(0.9977)、それ以外の所(表V.1.5.4-1(B),(D))では、ノイズを除去するために小さくなった(0.0000と0.0964)ことがわかる。特に、観測画像で余分なエッジが立っていた領域(表V.1.5.4-1(B))では、 $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$ の値は殆ど0になり(0.0000)、エネルギー関数中の滑らか拘束条件の項((V.1.2-1)の第1項)を最大限に利用していることがわかる。

図V.1.5.1-1(f)と表V.1.5.4-2からは、観測画像 $\{f_{ij}^{obs}\}$ においてノイズの加わっていた画素では(表V.1.5.4-2(A),(B))、 $\{b_{ij}\}$ の値が小さくなっており(0.2896と0.7587)、観測データを信頼していないことがわかる。逆に、ノイズの加わっていなかった画素では(表V.1.5.4-2(C),(D))、 $\{b_{ij}\}$ の値は大きくなっており(2.803と2.271)、観測

データを信頼していることがわかる。特に、図形の輪郭線の付近では(表V.1.5.4-2 (C))、 $\{b_{i,j}\}$ の値はより大きくなっており(2.803)、観測データにフィットさせることによって不連続性を保とうとしていることがわかる。

Geman らの結合MRFモデルを用いた取り扱い[Geman84]では、画素強度だけではなくエッジも独立変数と考え、エッジに関する事前知識(または制約条件)として、エッジの組み合わせ易さに関する原画像の知識が、局所的なポテンシャルの形でエネルギー関数中に表現されている。しかし、ポテンシャルの値を正確に決めるには、事前の学習が必要である。本アルゴリズムでは、原画像の正しいエッジを直接利用することができ、このような事前の学習は不要である。さらに、エッジの並進、回転、拡大縮小変換によらない画像修復をめざすことも可能である。

なお、計算時間はSIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)で約15分程度であった。パラメータ更新時の状態遷移のための試行回数も少ない回数で済んでおり、アルゴリズムの並列性が並列計算機の並列性を十分に引き出している。処理の高速化の点からは、熱平衡状態をGibbsサンプラーのような確率的な手法で生成してシミュレーテッド・アニーリングを行なう代わりに、II.2で述べたような平均場近似による決定論的アニーリングを用いることが望ましい考えられる。もし、十分な処理の高速化が実現できれば、本章(V.1)で述べた2層確率場モデルも、脳における情報処理の計算モデルの候補の一つとなり得るであろう。次節では、本モデルに平均場近似を用いた画像修復法について検討、考察する。

V.1.6 検討 -平均場近似の適用-

本節では、前節で取り扱った画像修復法に平均場近似を適用することを検討する。II.2で述べたように、離散値ニューロン s_i ($i=1, \dots, N$, $s_i=\{0,1, \dots, n-1\}$) が s_i という値をとる確率 $P(s_i)$ を独立変数に選んで、自由エネルギーの極小値を求める方法

では、 $(n-1) \times N$ 個の変数が必要となる。したがって、V.1.5.1における実験では、7(8階調) $\times 128 \times 64 = 57344$ 個のニューロンが必要となってしまう。そこで、(II.2.18)に示した方程式を繰り返し計算で解く方法を採用する。この方法ではN個の実数値ニューロンだけを考慮すれば良い。

(V.1.2-1)のエネルギー関数を、一般的に、次の2次関数で表す。

$$E(\{s_i\}; \{\theta_r\}) \equiv -\frac{1}{2} \sum_i \sum_j w_{ij} s_i s_j - \sum_i h_i s_i \quad (\text{V.1.6-1})$$

ただし、画素値 f_{ij} を離散値ニューロン s_i ($i=1, \dots, N, s_i=\{0, 1, \dots, n-1\}$)で表し、 $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$ や $\{b_{ij}\}$ のパラメータを $\{\theta_r\}$ で表すことにする。また、(V.1.6-1)の w_{ij} や h_i は、 $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}, \{b_{ij}\}, \{f_{ij}^{\text{obs}}\}$ の関数で、 s_i によらない定数の項は省いてある。

(V.1.6-1)のエネルギー関数 E を、ニューロン s_i の感ずる有効場 u_i を用いて次のように E_{mf} で近似する(平均場近似または分子場近似)。

$$E \approx E_{mf} \equiv -\sum_i u_i s_i \quad (\text{V.1.6-2})$$

$$u_i \equiv \frac{1}{2} \sum_j w_{ij} \langle s_j \rangle + h_i \quad (\text{V.1.6-3})$$

(V.1.6-2)の近似により、離散値ニューロン s_i の熱平均値 $\langle s_i \rangle$ は、次の再帰的な方程式を解くことにより計算できる。

$$\langle s_i \rangle \equiv \frac{\sum_{i=1}^N \sum_{s_i=0}^{n-1} s_i e^{-E/T}}{\sum_{i=1}^N \sum_{s_i=0}^{n-1} e^{-E/T}} \approx \frac{\sum_{s_i=0}^{n-1} s_i e^{u_i s_i / T}}{\sum_{s_i=0}^{n-1} e^{u_i s_i / T}} \quad (\text{V.1.6-4})$$

強磁性体における分子場理論[Oguchi70]とのアナロジーから、 $n=2S+1$ とおくと、

$$\langle s_i \rangle \approx \frac{\sum_{s_i=0}^{n-1} (s_i - S) e^{u_i (s_i - S) / T} + \sum_{s_i=0}^{n-1} S e^{u_i (s_i - S) / T}}{\sum_{s_i=0}^{n-1} e^{u_i (s_i - S) / T}} \quad (\text{V.1.6-5})$$

$$= \frac{\sum_{m=-S}^S m e^{mu_i/T}}{\sum_{m=-S}^S e^{mu_i/T}} + S \quad (\text{V.1.6-6})$$

$$= \frac{n-1}{2} \cdot B_s(u_i/T) + \frac{n-1}{2} \quad (\text{V.1.6-7})$$

と表されることがわかる。ここで、 $B_s(x)$ は、Brillouin 関数：

$$B_s(x) \equiv \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S}x\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{x}{2S}\right) \quad (\text{V.1.6-8})$$

である。 $n=2$ (2値ニューロン)では、 $S=1/2$ を(V.1.6-8)に代入すると、(V.1.6-7)の右辺は通常よく用いられるsigmoid関数と一致する。

したがって、温度 T におけるニューロン s_i (i.e.,画素値)の熱平均値 $\langle s_i \rangle$ は、

$$\begin{cases} u_i = \frac{1}{2} \sum_j w_{ij} \langle s_j \rangle + h_i \\ \langle s_i \rangle = \frac{n-1}{2} \cdot B_s(u_i/T) + \frac{n-1}{2} \end{cases}$$

を繰り返し計算により計算することで、近似的に求めることができる。

次に、パラメータの更新ルールについて述べる。温度 T における(V.1.6-7)の解を、 $\{\langle s_i \rangle^*, u_i^*\}$ とする。理想的なエッジ画像 $\{l_i^0\}$ と現在のエッジの状態 $\{l_i^*\} = R_h(\{\langle s_i \rangle^*\})$ とおく。ただし、 l_i は0から1の実数値をとり、 R_h はエッジ抽出処理で1階微分可能とする。 $\{l_i^0\}$ と $\{l_i^*\}$ との相違量を、

$$U_{err}(\{\theta_r\}; T) = \frac{1}{2} \sum_i (l_i^0 - l_i^*)^2 \quad (\text{V.1.6-9})$$

で定義する。これに最急降下法を用いると、

$$\frac{d\theta_r}{dt} = -\frac{\partial U_{err}}{\partial \theta_r} = \sum_i (l_i^0 - l_i^*) \frac{\partial l_i^*}{\partial \theta_r} \quad (\text{V.1.6-10})$$

となる。ここで、

$$\frac{\partial l_i^*}{\partial \theta_r} = \sum_i \frac{\partial R_{th}(\{\langle s_i \rangle^*\})}{\partial \langle s_i \rangle^*} \cdot \frac{\partial \langle s_i \rangle^*}{\partial \theta_r} \quad (\text{V.1.6-11})$$

が成り立っているが、 $\frac{\partial \langle s_i \rangle^*}{\partial \theta_r}$ の値は、次の連立1次方程式を解くことによって得られる。

$$\frac{\partial \langle s_i \rangle^*}{\partial \theta_r} = \frac{n-1}{2} \cdot \frac{dB_s(u_i^*/T)}{du_i^*} \cdot \frac{\partial u_i^*}{\partial \theta_r} \quad (\text{V.1.6-12})$$

$$= \frac{n-1}{2} \cdot \frac{dB_s(u_i^*/T)}{du_i^*} \cdot \left[\frac{1}{2} \sum_j w_{ij} \frac{\partial \langle s_j \rangle^*}{\partial \theta_r} + \frac{1}{2} \sum_j \frac{\partial w_{ij}}{\partial \theta_r} \langle s_j \rangle^* + \frac{\partial h_i}{\partial \theta_r} \right] \quad (\text{V.1.6-13})$$

ただし、途中で、(V.1.6-3)の関係式を用いた。

したがって、エッジ情報を用いた画像修復の問題を、2層確率場モデルに平均場近似を施して得られた決定論的なモデルと、(V.1.6-10)-(V.1.6-13)のパラメータ更新ルールを用いて解くことができる。

V.2 特徴点を用いたエッジ修復への応用

2 層確率場モデルを用いた逆問題の解法の応用例として、与えられた特徴点（コーナーや直線部分）に関する情報を用いてエッジを修復する問題を取り上げる [Igarashi93-2]。

V.2.1 背景

濃淡画像のデータ圧縮と画像復元という立場に立つと、画素強度が滑らかに変化する領域ではサンプリング間隔が疎でよく、画素強度が不連続に変化する点（エッジ）では、逆に密にするのが望ましい。この考えをつきつめると、エッジ情報を十分に有効に利用することができれば、画像の復元に必要な画素強度の情報（データ点）は、極めて少なく済むであろうと考えられる。実際、V.1でも述べたように、人間の視覚情報処理に関して、エッジで囲まれた内部領域に画素情報（明度、色）が充填される "filling-in" という処理過程が存在することが知られている。この filling-in 過程の存在から、可視表面のすべての情報が中枢に送られるのではなく、明度や色などが不連続的に変化している境界の部分の情報だけが脳の中枢に伝わり、中枢ではこれらの不連続情報をもとに明度や色の情報を充填して、実世界を再構成したものが知覚されているという説も唱えられている [Inui90][Sugie73]。V.1では、この filling-in 過程を 2 層確率場モデルによりモデル化できることを示し、トップダウン的に与えられたエッジ情報から画像を再構成（復元）する問題を取り扱った。

さらにこの考えを推し進めると、エッジもエッジの不連続点（コーナー）や、曲率の大きな点などのより高次の特徴点に関する情報を用いて、少ないデータから効率的に復元できる可能性があると考えられる [Hongo91][Inui89]。曲線からなる

図形に関しては、すでに、曲率の大きな輪郭点を特徴量として抽出し、スプライン曲線で補間することにより輪郭線を復元するという研究が報告されている [Inui89]。

また、図形の認識という観点から考えても、オクルージョンなどで欠損のある不完全な情報や、ノイズが加わった画像から図形を認識する際には、入力画像と図形のモデルとの照合を行なう過程で、画像復元（修復）、認識、領域分割の 3 つのプロセス間の相互作用が必要となる。例えば、コーナー（角）という高次レベルの特徴量の空間内で、図形のモデルと入力データとのマッチングをとり、ある図形のモデルが入力画像中に存在するという仮説に立って、低次レベルの情報（エッジや画素強度）を復元し、その結果を再び領域分割や認識に役立てるといふサイクルが考えられる。単に、入力画像中に存在する図形が何であるのかを判定するだけではなく、トップダウン的に高次レベルの知識や情報を用いて低次レベルの情報をも復元し、外部世界に対する矛盾のない解釈を脳の内部に再構成しているのが、人間の行なっている画像理解であろう。このような立場からの計算モデルも提案されている [Kawato90]。こうしたトップダウン的な制御の例として、入力画像中に複数文字が重なった場合の文字認識や、不完全な文字画像から完全な文字パターンを連想する方法として、選択的注意機構を有するネオコグニトロンが提案されている [Fukushima86]。しかし、工学的な見地からは、やや複雑な機構を持ったモデルとなっている。本研究では、2 層確率場モデルを用いることにより、エネルギー最小化というシンプルな枠組みの中で、トップダウン的な制御を実現することを目標としている。

以下では簡単のために、直線線分だけからなる多角形図形だけを考えることにする。高次レベルの特徴量としては、“コーナー”（角）と、“長直線部分”（直線の領域がある程度広がっている輪郭線の部分）との 2 種類を考え、与えられた特徴量からエッジを修復・復元する問題を取り扱うことにする。これら特徴点に関する情報は、図形認識の場合には、入力画像により想起された図形モデルから与え

られ、データ圧縮や通信などへの応用を考える場合には、あらかじめ入力画像から抽出しておいた情報を用いるというようにトップダウン的に与えられるものとする。

V.2.2 全体の処理の流れ

2つの格子点集合 S, S' 上で定義された確率場 (random field) をそれぞれ X, X' とする。確率場 X は、エッジ(ベクトル場)に対応し、確率場 X' は特徴点の場(ベクトル場)に対応している。2層確率場モデルにおける下層と上層にそれぞれ対応している。エッジ修復問題では、エッジから特徴点を抽出する操作 R を用いて下層と上層の状態が関連づけられている。

与えられた特徴点 (コーナーや直線部分) に関する情報を用いてエッジを修復する問題を、2層確率場モデルを用いて解く場合も、画像修復の場合(V.1.4)と同様に次の様なフローチャートで表すことができる。ただし、 $\{\theta\}$ は確率場 X 上に定義されたエッジのエネルギー関数 E 中のパラメータである。

【全体の処理の流れ】

step1: アニーリング温度列 $\{T_i\} (i=0, \dots, n)$ を設定する。

step2: パラメータ $\{\theta\}$ と温度 T を初期値に設定する。

step3: システムを熱平衡状態に到達させる。

step4: (IV.3.1-5)の右辺の量を観測し、 $\{\theta\}$ の値を更新する。

step5: step3 とstep4 を $\{\theta\}$ の更新量が0になるまで、十分な回数だけ繰り返す。

step6: $i \leftarrow i+1, T \leftarrow T_i$ とする。

step7: if $i \leq n$ then step3へ戻る。

step8: システムの収束先のエッジ画像に後処理を加える。 [処理終了]

この処理フローからわかるように、アニーリングによるエネルギー最小状態の探索過程において、特徴点抽出処理Rの下で、望ましい特徴点の状態(ω'_j)がなるべく高頻度で出現するように、エッジを生成する源となっているエネルギー関数の形をパラメータ値の変更という操作を通して変えていこうというのが、2層確率場モデルを用いることの基本的な考えである。

V.2.3 実験

V.2.3.1 エッジ画像の作成

正方格子点(i,j)上の画素強度を f_{ij} ($0 \leq f_{ij} \leq 7$)、エッジベクトルを I_{ij} で表わす。エッジベクトル I_{ij} は、エッジの存在を表わす2値変数 ρ^i_{ij} ($=\{0,1\}$)と、エッジの方向角 θ_{ij} ($0 \leq \theta_{ij} < \pi$)を用いて、 $I_{ij} = \rho^i_{ij}(\cos \theta_{ij}, \sin \theta_{ij})$ で表わされる。今回の実験で用いたエッジ画像は以下の様な方法で作成した。

【エッジ画像の作成法】

- [1] 画像 $\{f_{ij}\}$ にラプラシアン・ガウシアンオペレーター $\nabla^2 G$ を作用させ、ゼロ交差点を求める。ゼロ交差点では、エッジが存在していると考えて、 $\rho^i_{ij} = 1$ とする。
- [2] それらのゼロ交差点において、Sobelオペレーターを作用させ、画像の濃度勾配ベクトルを計算する。
- [3] 濃度勾配ベクトルに直交する方向角を計算し、エッジの方向角 θ_{ij} とする。

ただし、オペレーターの作用する点からの距離を r とおくと、

$$\nabla^2 G \equiv \frac{1}{\pi\sigma^4} \left(\frac{r^2}{2\sigma^2} - 1 \right) e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} \quad \text{である。}$$

V.2.3.2 特徴点の抽出

輪郭線（エッジ）上の特徴点として、“コーナー”（角）と、“長直線部分”（直線の領域がある程度広がっている部分）との2種類を考えた。それぞれを、

$d_{ij} = \rho_{ij}^d (d_{ij}^1, d_{ij}^2)$ と $s_{ij} = \rho_{ij}^s (\cos \phi_{ij}, \sin \phi_{ij})$ とで表わす。ここで、 d_{ij}^1 と d_{ij}^2 は、コーナーを形成する2つの単位ベクトルであり、 $d_{ij}^k = (\cos \theta_{ij}^{(k)}, \sin \theta_{ij}^{(k)})$ ($k=1,2$)、 $0 \leq \theta_{ij}^{(1)} < \theta_{ij}^{(2)} \leq \pi$ で表す。 ϕ_{ij} は長直線の傾きを表し、 $0 \leq \phi_{ij} < \pi$ とする。また、 ρ_{ij}^d と ρ_{ij}^s とは、それぞれ、コーナーと長直線部分とが、格子点(i,j)上に存在することを表わす、0または1の2値変数である。特徴点は、エッジが立っている点 ($\rho_{ij}^d=1$)でのみ存在する。V.2.3.1で得られたエッジ画像 $\{l_{ij}\}$ に対して、以下の様な方法で特徴点を抽出した。

【特徴点の抽出法R】

[1]方位を n_θ 等分に量子化し、格子点(i,j)から方位区分 θ_k ($k=1, \dots, n_\theta$)、半径 R_θ 以内であり、エッジが立っている格子点の集合を、 $\Omega_{ij}(\theta_k, R_\theta)$ とする。もし、

$$\sum_{l_{p,q} \in \Omega_{ij}(\theta_k, R_\theta)} \left[\frac{(r_{p,q} - r_{i,j})}{\|r_{p,q} - r_{i,j}\|} \cdot l_{p,q} \right]^2 \geq Th_{ds}$$

であれば、(i,j)から θ_k の方向に向けて直線がのびていると判断する。ただし、 $r_{x,y}$ は、格子点(x,y)の位置ベクトルを表わしているが、もし、 $r_{p,q} = r_{i,j}$ ならば[]内の値は1とする。

[2]すべての方位 θ_k ($k=1, \dots, n_\theta$) に対して、[1]の判断を行なう。

[3]異なる2方向にのみ直線がのびていると判断されたエッジ格子点をピックアップ

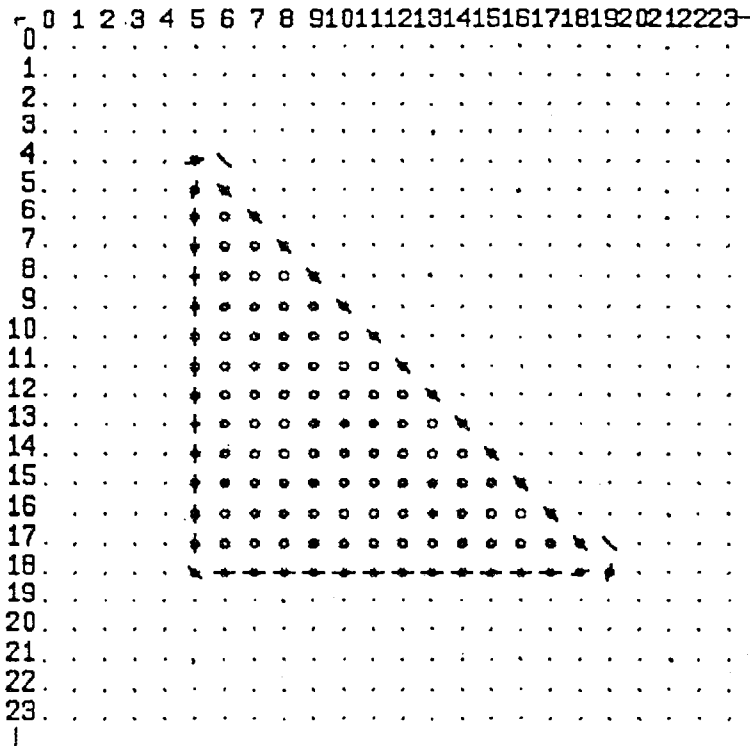
プする。

[4] 2つの直線が平行に近ければ、その特徴点を"長直線部分"であると判定する。

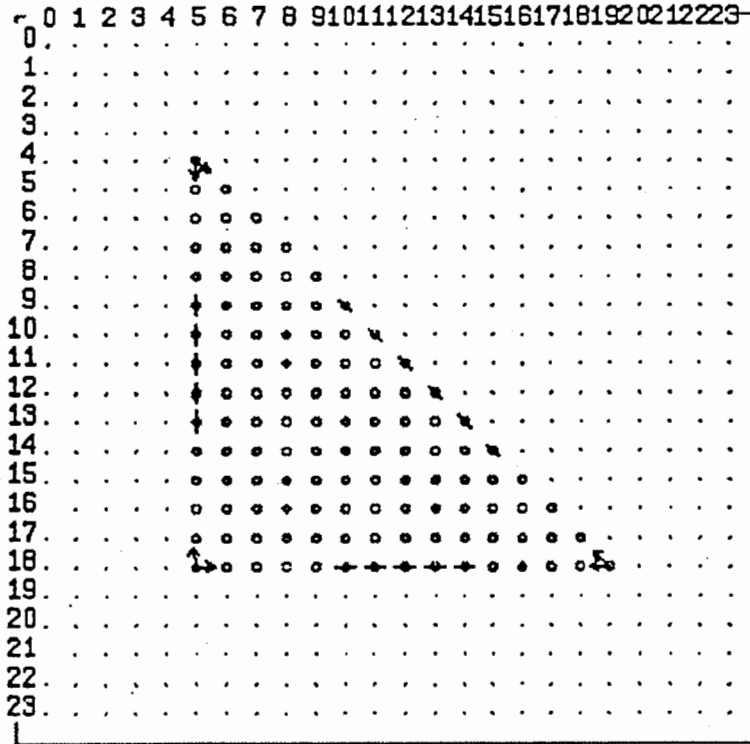
[5] それ以外の[3]でピックアップされた点を、"コーナー"と判定する。

上の定義でわかるように、"長直線部分"とは、一直線上に存在するエッジ点であり、"コーナー"とは、折れた直線の曲がり角のエッジ点を意味している。また、特徴点の両脇には2つの直線がのびていなければならない。[3]からわかるように、今回は交差点やT字路等は考慮しなかった。

図V.2.3.2-1に、エッジ画像を作成した例(a)と、特徴点を抽出した例(b)を示す。ただし、格子間隔は1.0とし、 $\nabla^2 G$ は13×13のマスクオペレーターで近似し、 $\sigma = 1.0$ とした。また、 $n_g = 36$, $R_g = 7.1$, $Th_{gs} = 4.1$ と設定してある。



図V.2.3.2-1(a) テスト画像と抽出されたエッジ (丸印(○)は画素強度4の画素、ドット(.)は、画素強度0の画素、線分はエッジの向き、数字は座標値を表わしている)。



図V.2.3.2-1(b) テスト画像と抽出された特徴点（コーナー(角)は2つの矢印(→)で、長直線部分は線分で、向きとともに示されている）。

V.2.3.3 エネルギー関数

V.2.2で述べたように、エッジの確率場を考えて、その確率分布が、あるエネルギー関数 $E(\{I_{ij}\})$ を用いてGibbs分布で与えられるとする。エネルギー関数としては、Gemanら[Geman84]が用いたように、局所的なエネルギーの和で表現されている形のものを用いた方が、並列処理に向いており将来性がある。そこで、エッジのエネルギー関数として次のものを考えた。以下では、表現を簡潔にするために、連続的な場を用いている。

$$\begin{aligned}
 E(\{l(x)\}, \{a_k(x)\}, \{d(x)\}, \{s(x)\}) &= \frac{1}{2} \int d^2x \left[a_1(x) \{l(x) - l^{obs}(x)\}^2 \right. \\
 &+ a_2(x) \{ (l(x) \cdot \nabla) l(x) \}^2 (1 - \rho^d(x)) + a_3(x) \{ divl(x) \}^2 \\
 &\left. + a_4(x) \int_{\Omega_k(x)} U_{lc}(l(x), d(x')) d^2x' + a_5(x) \int_{\Omega_s(x)} U_{ls}(l(x), s(x')) d^2x' \right]
 \end{aligned}
 \tag{V.2.3.3-1}$$

(V.2.3.3-1)の第1項は、観測データ $l^{obs}(x)$ との距離を表わしているデータ項である。第2項は、エッジに沿った曲線の曲率が、その点でコーナーがなければ(i.e. $\rho^d(x) = 0$)小さくなり、逆に、コーナーがあれば、曲率が大きくてもかまわないことを表現している[Sato90-2]。第3項は、エッジがある点で生成・消滅しないための条件になっており、エッジが途切れたり、分岐しないように作用する[Sato90-2]。第2項と第3項は、エッジの回転不変なエネルギー関数として佐藤[Sato90-2]により提案されている項である。ただし、(V.2.3.3-1)では第2項を、特徴点の影響を考慮した形に変えてある。

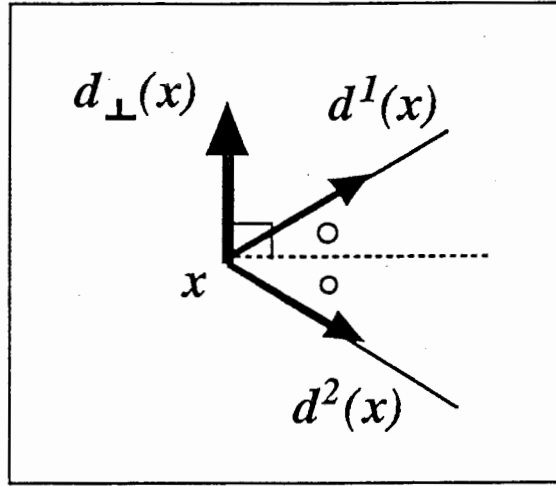
また、第4項と第5項は、エッジとコーナーとの相互作用と、エッジと長直線部分との相互作用とをそれぞれ表わしている。ここでは、それらの相互作用の形を次のように仮定した：

$$U_{lc}(l(x), d(x')) = \begin{cases} \left[1 - (l(x) \cdot d_{\perp}(x'))^2 \right] \cdot \rho^d(x') & \text{if } x = x' \\ \left[1 - (l(x) \cdot d^1(x'))^2 \right] \left[1 - (l(x) \cdot d^2(x'))^2 \right] \\ \cdot e^{-\frac{|x-x'|}{\xi_k}} \cdot \rho^d(x') & \text{if } x \neq x' \end{cases}
 \tag{V.2.3.3-2}$$

$$U_{ls}(l(x), s(x')) = \left[1 - (l(x) \cdot s(x'))^2 \right] \cdot e^{-\frac{|x-x'|}{\xi_s}} \cdot \rho^s(x').
 \tag{V.2.3.3-3}$$

$d_{\perp}(x')$ は、ベクトル $\{d^1(x') + d^2(x')\}$ を 90° だけ左に回転させて大きさを1に正規

化した方向ベクトルであり(図V.2.3.3-1)、 ξ_{lc} と ξ_{ls} は相互作用が距離と共に減衰していく程度を表わす定数である。



図V.2.3.3-1 $d_{\perp}(x)$ の定義

(V.2.3.3-2)の定義からわかるように、コーナーは、コーナーと同一点上にあるエッジに対しては、コーナーの開いている方向($d^1(x)$ と $d^2(x)$ の2等分線の方向)に対して垂直になる様に作用し、それ以外の近傍のエッジに対しては、コーナーを形成する2つの直線のうちのどちらかに平行になるように作用している。また、(V.2.3.3-3)から、長直線部分の近傍では、直線の方角を向くようにエッジに力が働いていることがわかる。なお、(V.2.3.3-1)式中の $\Omega_{lc}(x)$ と $\Omega_{ls}(x)$ は、 x の近傍を表わし、ここでは、半径がそれぞれ R_{lc} 、 R_{ls} の円内の領域とした。以下の実験では、 $\xi_{lc} = \xi_{ls} = 1.0$ 、 $R_{lc} = R_{ls} = 4.0$ と設定し、(V.2.3.3-1)中の $\{d(x)\}$ と $\{s(x)\}$ はトップダウン的に与えて固定している。エネルギー関数(V.2.3.3-1)の $\{a_k(x)\}$ ($k=1, \dots, 5$)が、V.2.2でのパラメータ $\{\theta\}$ に対応しており、(IV.3.1-5)の更新ルールによりアニーリング中に自動調整される。

V.2.3.4 条件付き確率 $P(\omega'_0 | \omega)$

エッジから特徴点を抽出する操作Rを用いて、特徴点の状態はエッジの状態から、決定論的に一意に定まる。しかしながら、アニーリングの初期は高温で、しかも、パラメータ調節の開始時には、パラメータの値が適切でないことから、望ましい特徴点の状態 ω'_0 が出現するのはきわめてまれであり、かなりの長時間にわたる時間平均操作が必要となる。そこで、(IV.3.1-5)の更新則を用いる際には、0または1の値をとる条件確率 $P(\omega'_0/\omega)$ を、 ω'_0 と $R(\omega)$ との類似度を表わす関数 $f(\omega'_0, R(\omega)) \in [0,1]$ で近似する。具体的には、

$$P(\omega'_0|\omega) \approx f(\omega'_0, R(\omega)) \equiv \frac{1 - g(\|R(\omega) - \omega'_0\|; h, \rho)}{1 - g(0; h, \rho)} \quad (\text{V.2.3.4-1})$$

というように、0から1までの実数の連続値で近似する。ここで、 $g(x; h, \rho)$ は、シグモイド関数で、

$$g(x; h, \rho) \equiv \frac{1}{2} \left\{ \tanh\left(\frac{x-h}{\rho}\right) + 1 \right\} \quad (\text{V.2.3.4-2})$$

で定義され、距離 $\| \cdot \|$ は、

$$\|\omega' - \bar{\omega}'\| \equiv \sqrt{\sum_{i,j} \sum_{k=1,2} (\rho_{i,j}^d \cdot d_{i,j}^k - \bar{\rho}_{i,j}^d \cdot \bar{d}_{i,j}^k)^2 + 2 \sum_{i,j} (s_{i,j} - \bar{s}_{i,j})^2} \quad (\text{V.2.3.4-3})$$

$$[\omega' = (d_{i,j}, s_{i,j}), \bar{\omega}' = (\bar{d}_{i,j}, \bar{s}_{i,j})]$$

で定義されている。

V.2.3.5 エッジ整形のための後処理

最終的に得られたエッジの状態に、V.2.3.2で述べた特徴点の抽出法Rを施して得

られる特徴点の状態と、与えられた特徴点の状態とが完全に一致する様にアニーリング中に重み係数の値を調節していくのが本方式であるが、たとえ不必要なエッジが立っていたとしても、この特徴点のレベルでの一致は起こりうる。なぜならば、特徴点の状態を指定するだけでは、望ましいエッジの状態を完全には規定していないからである。もし、望ましいエッジだけを立たせたいときには、不必要なエッジが立たないことを要請する項を、エネルギー関数中に加えておかなければならない。

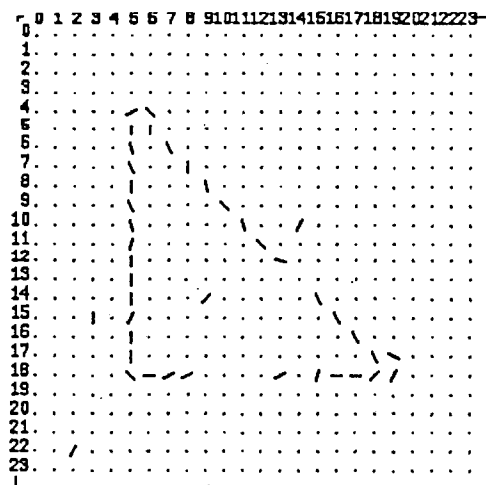
しかし、ここでは、エネルギー関数の形をより複雑にすることは避けて、次のような後処理により不必要なエッジを取り除き、エッジの整形を行なうことにする。

【エッジ整形のための後処理】

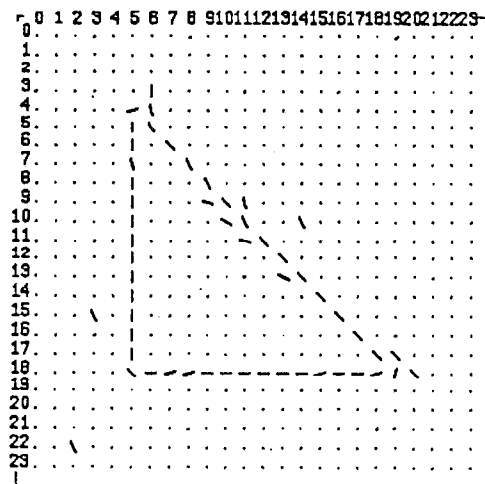
- [1] 半径 R_e 以内に特徴点があれば、特徴点の抽出に無関係と考えて、そのエッジを削除する。
- [2] "特徴点の抽出法 R"の[2](V.2.3.2)により、どの方向にも直線がのびていないと判断されたエッジも、同様な理由で削除する。
- [3] 8近傍で隣接するエッジの個数が、2に満たない場合には、そのエッジは孤立していると判断して削除する。

V.2.3.6 実験結果と考察

図V.2.3.2-1の(a)で示されたオリジナルのエッジ画像に対して、ガウシアンノイズを加えることにより、エッジの観測画像 $\{I^{obs}(x)\}$ を作成した(図V.2.3.6-1)。すべてのエッジ変数について状態更新を試みることを1スキャンとすると、本実験では、熱平衡状態を実現するためのスキャン回数を一律20回とした。V.2.2のstep5で

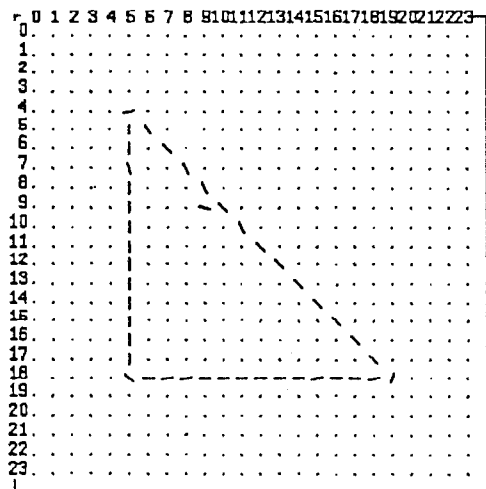


図V.2.3.6-1 ノイズが加えられたエッジ画像 $\{l^{obs}(x)\}$ (ドット(.)は格子点の位置を表わしている)
 Fig.V.2.3.6-1 An edge image $\{l^{obs}(x)\}$ degraded by noise. (Dotts(.) mean positions of lattice points.)



図V.2.3.6-2(a) エッジ画像の修復結果(後処理の実行前)

Fig.V.2.3.6-2(a) An edge image restored.(before applying the postprocessing described in § V.2.3.5)



図V.2.3.6-2(b) エッジ画像の修復結果(後処理の実行後)

Fig.V.2.3.6-2(b) An edge image restored.(after applying the postprocessing described in § V.2.3.5)

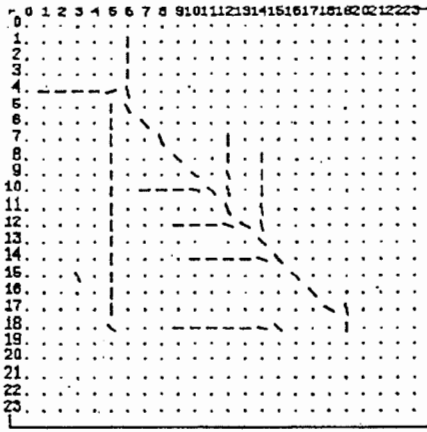
のパラメータ値の更新回数も50回に固定した。実験に用いたアニーリング温度列 $\{T_i\}$ ($i=1, \dots, 14$) と、(V.2.3.4-1)の h と ρ 、(IV.3.1-5)の左辺を離散時間で近似した場合 ($d\theta/dt \sim \Delta\theta/\Delta t$) の時間幅 Δt の値を表V.2.3.6-1に示す。本方式により修復されたエッジ画像を図V.2.3.6-2に示す。エッジ整形のための後処理では、 $R_{cr}=4.0$ と設定してある(図V.2.3.6-2.(b))。

$\{T_i\}$	h	ρ	Δt
0.50	3.0	0.5	0.05
0.20	3.0	0.5	0.05
0.18	3.0	0.5	0.05
0.16	2.5	0.5	0.05
0.14	2.0	0.5	0.05
0.12	2.0	0.5	0.05
0.10	1.5	0.5	0.05
0.08	1.5	0.5	0.04
0.06	1.5	0.5	0.04
0.04	1.5	0.5	0.02
0.02	1.5	0.5	0.01
0.01	1.5	0.5	0.01
0.005	1.5	0.5	0.01
0.001	0.1	0.1	0.01

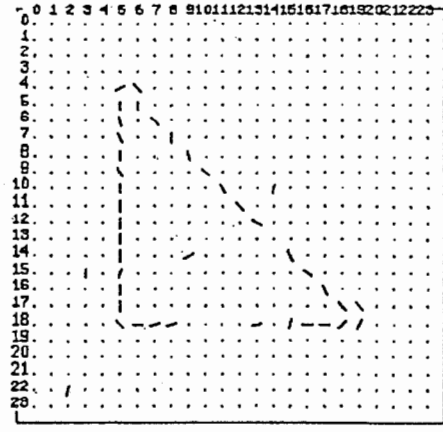
表V.2.3.6-1 実験に用いたアニーリング温度列 $\{T_i\}$ ($i=1, \dots, 14$) と、 $h, \rho, \Delta t$ の値

また、(V.2.3.3-1)のエネルギー関数中の重み係数 $\{a_k(x)\}$ ($k=1, \dots, 5$) の初期値は、すべて1.0とした。V.2.2のstep3ではメトロポリス法を用いたが、 ρ'_{ij} の試行変形には $\rho'_{ij}=0$ と $\rho'_{ij}=1$ を等確率でランダムに選び、エッジの方向角 θ_{ij} も0から π の間から一様乱数によりランダムに選んだ。

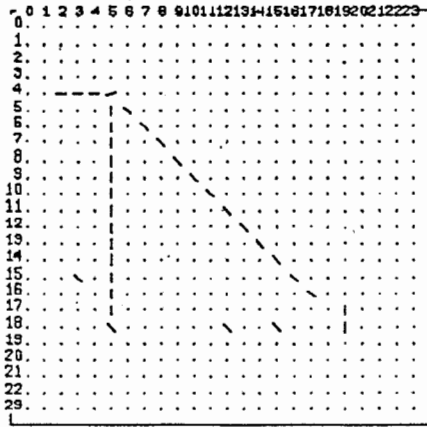
比較のために、 $\{a_k(x)\}$ を更新しないで、すべての格子点上で1.0に固定してアニーリングを行なった場合(図V.2.3.6-3.(a))と、各 k ($k=1, \dots, 5$) について、 a_k のみを10.0に、他を1.0に固定してアニーリングを行なった場合の結果を図V.2.3.6-3に示す(図V.2.3.6-3.(b),(c),(d),(e),(f))。ただし、図V.2.3.6-3ではエッジ整形のための後処理は施していない。



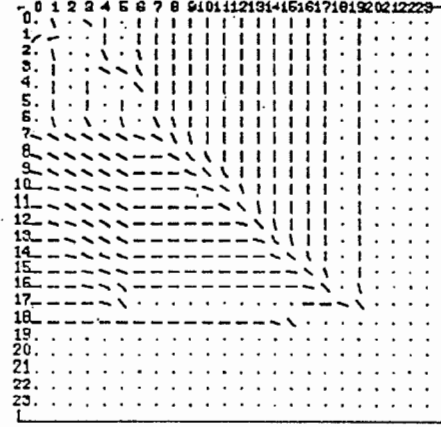
(a)



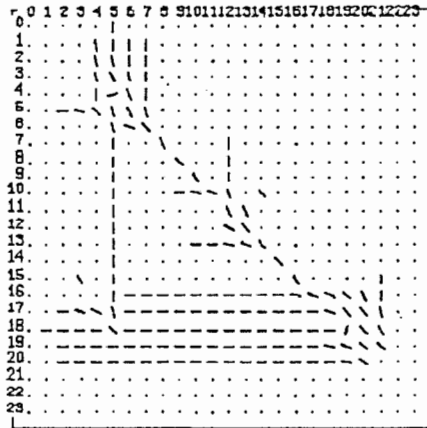
(b)



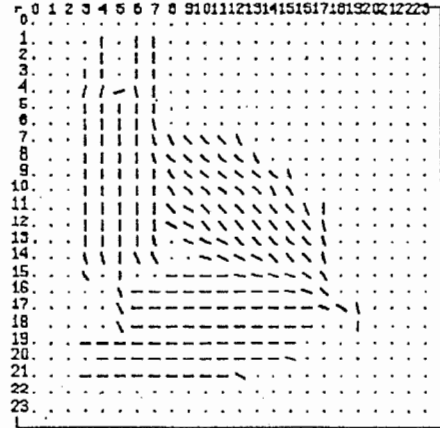
(c)



(d)



(e)



(f)

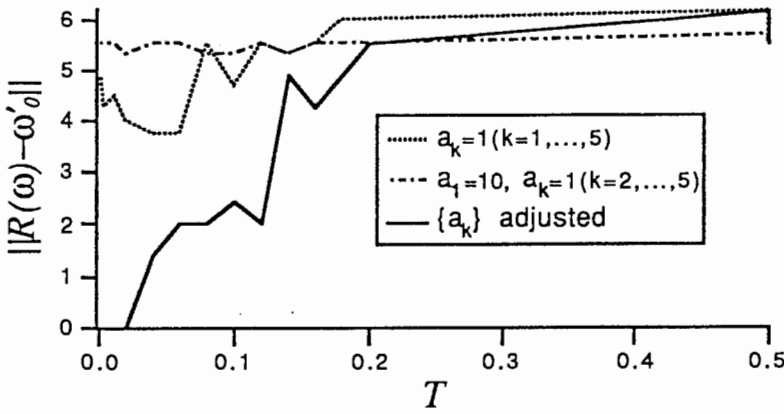
図V.2.3.6-3 固定された重み係数を用いた場合に得られたエッジ画像（後処理は実行していない）：(a) $a_k=1(k=1, \dots, 5)$ (b) $a_1=10, a_k=1(k=2, 3, 4, 5)$ (c) $a_2=10, a_k=1(k=1, 3, 4, 5)$ (d) $a_3=10, a_k=1(k=1, 2, 4, 5)$ (e) $a_4=10, a_k=1(k=1, 2, 3, 5)$ (f) $a_5=10, a_k=1(k=1, 2, 3, 4)$.

さらに、(IV.3.1-5)の更新則により得られた、最終的な重み係数 $\{a_k(x)\}$ の値の一例を表V.2.3.6-2に示す。表V.2.3.6-2には、三角形の下の辺上での $\{a_k(x)\}$ の値が示されている。なお、処理に費やされた計算時間は、SUN Sparc2(28.5MIPS, 4.2Mflops)を用いて約29時間であった。

(i,j)	a_1	a_2	a_3	a_4	a_5
(4,18)	1.150899	1.055584	0.609115	0.957984	1.000000
(5,18)	1.552794	1.000000	0.000406	1.526840	1.000000
(6,18)	2.898093	1.511962	1.324253	1.686186	1.034254
(7,18)	3.250513	0.927530	0.525297	1.302933	1.161967
(8,18)	3.463454	0.853844	1.250072	1.117420	1.497411
(9,18)	0.075462	1.171470	1.495524	1.033021	2.160178
(10,18)	0.000002	0.433179	0.974197	1.000000	3.878554
(11,18)	0.522819	0.073321	0.074749	1.000000	2.245218
(12,18)	0.107161	0.607695	0.688265	1.000000	2.135121
(13,18)	0.001720	0.577880	0.535229	1.000000	2.269342
(14,18)	0.000002	0.713944	1.374457	1.000000	2.612229
(15,18)	1.530803	1.012543	0.890226	1.021463	1.640046
(16,18)	1.885234	0.882868	1.386782	1.048609	1.192446
(17,18)	2.077078	0.879766	1.103420	1.142438	1.070868
(18,18)	1.340182	1.149017	0.176241	1.266780	1.013756
(19,18)	0.963648	1.000000	0.094761	1.981485	1.000000
(20,18)	0.002941	0.522347	0.337762	2.152906	1.000000

表V.2.3.6-2. 最終的に得られた重み係数 $\{a_k(x)\}$ の値の一例。 $\{a_k(x)\}$ の初期値は、すべて1.0である。(i,j)は位置xの座標を表わしており、iは横軸の座標値、jは縦軸の座標値である。

図V.2.3.6-4に、各温度ステップ T_i での最終状態 ω と、望ましい特徴点の状態 ω'_0 との特徴点空間内での距離 $\|R(\omega) - \omega'_0\|$ の値を示す。比較のために、係数の更新を行なわなかった場合と、データ項の重み a_1 のみを10.0、残りの係数を1.0に固定してアニーリングを行なったときの値も表示してある。



図V.2.3.6-4 各温度ステップ T_i での最終状態 ω と、望ましい特徴点の状態 ω'_0 との特徴点空間上での距離 $\|R(\omega) - \omega'_0\|$ の値.

図V.2.3.6-3や図V.2.3.6-4からわかるように、重み係数 $\{a_k(x)\}$ の値を適当に選んで固定してしまうと、アニーリングを行っても、望ましい特徴点を抽出できるようなエッジ画像を得ることは容易ではない。しかし、(IV.3.1-5)で示した、2層確率場モデルのパラメータの更新ルールを用いれば、エッジ空間でのエネルギー最少状態から抽出された特徴点の状態が、特徴点の空間でトップダウン的に与えた望ましい状態と一致するように、重み係数の値を調節することができる。また、V.2.3.5で述べたエッジ整形の後処理も、図V.2.3.6-2から有効であることがわかる。

表V.2.3.6-2に示された重み係数の値を見ると、図V.2.3.6-1の観測されたエッジ画像 $\{I^{obs}(x)\}$ において、ラインの消えていた点、 $(i,j)=(9,18),(10,18),\dots,(14,18)$ [i ; 横軸、 j ; 縦軸]では、データの信頼性が小さいのでデータ項の重み a_1 の値は小さくなり(0.0~0.52)、逆に、長直線部分からの影響を重んじて、 a_5 の値が大きくなっている(2.14~3.88)。さらに、三角形の頂点(5,18), (19,18)の付近では、 a_4 の値が他の場所での値と比較して大きくなり、コーナーとの相互作用を強めているのがわかる。

本章(V.2)では、2層確率場モデルをコーナー(角)と長直線部分(直線部分の中央部)という2種類の特徴点に関するトップダウン的な情報からエッジを修復する問題に適用して、2層確率場モデルの有効性を示すことができた。2層確率

場モデルでは、エネルギー関数中の場所に依存する重み係数の値を、アニーリングの過程で、上記の 2 種類のトップダウン情報と整合性がとれるように適切に調節していくことができる。

現在のアルゴリズムでは、非常に長時間の計算時間を必要としている(Sparc2 で約 29 時間)。エネルギー関数が局所的な形をしているので、コネクションマシンなどの SIMD 型の並列計算機を利用することや、パラメータの更新則を局所処理用に簡略化すること(V.1.3)や、平均場近似を用いて 2 値変数 ρ'_{ij} をアナログ化し [Sato90-2]、決定論的なアニーリングを用いるというような方法が、高速化のための改良策として考えられる。

今回は、特徴点の絶対的な位置情報をも利用しているが、並進、回転、拡大縮小という変形が加わった場合のエッジ修復問題に対しても、特徴点空間上での距離を工夫することなどにより、本モデルは適用できると考えられ、今後、試みて行く予定である。

また、図形認識や面の判定、解釈の一意性などの、より高次レベルでの視覚情報処理と組み合わせて、2 次元や 3 次元の画像再構成のモデルを構築することも可能と考えられる。さらに、画像圧縮の一手法としても応用が期待できる。

V.3 巡回セールスマン問題への応用(I)

V.3.1 背景

IV.4.2で述べたように、Hopfield-Tankによる方法は、組合わせ最適化問題の解法として一般性がある。しかし、かれらの方法を巡回セールスマン問題に適用すると、制約条件を満たさない状態に収束してしまう場合が多いことが指摘されている[Wilson88]。その原因の一つとして、エネルギー関数中のパラメータの値が適切でないという点が挙げられている[Wilson88][Van den Bout89][Peterson89]。一般に、エネルギー関数は、解が満たすべき制約条件の項と、最低にしたいコストの項から成り立っている。もし、この制約条件の項の重みを表わすパラメータの値が小さすぎると、コスト項を重要視して最低コストとなる状態に収束するが、その状態は制約条件を満たさない。逆に、値が大きすぎると、制約条件は満たしていてもコスト値が小さな解に収束してくれるとは限らない[Van den Bout89]。適用する問題によっては、パラメータの値に結果が非常に敏感で[Wilson88][Peterson89]、適切な値の範囲が、パラメータ空間内でかなり狭い範囲に限られてしまう場合もあることが報告されている[Hegde88]。また、自由エネルギーの極小値は、必ずしも大局的な最小値であるとは限らない。

パラメータの値に関するこのような問題点は、Hopfieldらの平均場近似モデルだけではなく、本来の離散値ニューロン系モデルにおいて、既に存在している根本的な問題点である。本章(V.3)では、IV.4.3で述べたように、解が満たすべき制約条件の項と、最低にしたいコストの項から成り立っているエネルギー関数を用いる。さらに、大局的な最小値を求めるためにsimulated annealing法を用いて組合わせ最適化問題を解く際に、制約条件項の重み係数の値を、アニーリング操作を行ないながら適切に定めることを試みる[Igarashi92-2]。

V.3.2 エネルギー関数

巡回セールスマン問題とは、“与えられた都市と都市間距離を用いて、すべての都市を1度ずつ回る経路の中で、最短の経路を求める問題”と定義される。

IV.4.3で述べたように、エネルギー関数を、制約条件項(ペナルティ項)とコスト項の線形和で表す。

離散値ニューロン変数(スピン変数)を $s_{i,k}$ (0または1)として、都市 i を k 番目に訪問することを $s_{i,k} = 1$ 、訪問しないことを $s_{i,k} = 0$ で表わすことにする。エネルギー関数を、

$$E = \frac{A}{2} \sum_i \left(\sum_k s_{i,k} - 1 \right)^2 + \frac{B}{2} \sum_k \left(\sum_i s_{i,k} - 1 \right)^2 + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \sum_k d_{ij} s_{i,k} (s_{j,k+1} + s_{j,k-1})$$

$$[A \geq 0, B \geq 0] \quad (\text{V.3.2-1})$$

とすれば、第1項と第2項とが(IV.4.3-1)の E_{cond} にあたり、 $(\sum_k s_{i,k} - 1)^2$ や $(\sum_i s_{i,k} - 1)^2$ が(IV.4.3-2)の $\phi_r(\omega_s)$ にあたる。第3項中の d_{ij} は、都市 i と都市 j との間の距離を表わし、第3項が(IV.4.3-1)の E_{cost} に相当する。また、 A, B は、 $\phi_r(\omega_s)$ の各項の重みを表わすパラメータ $\{\theta_r\}$ であるが、ここではこの2種類だけを考えている。すべてのパラメータが完全に独立である場合、すなわち、エネルギー関数が

$$E = \frac{1}{2} \sum_i A_i (\sum_k s_{i,k} - 1)^2 + \frac{1}{2} \sum_k B_k (\sum_i s_{i,k} - 1)^2 + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \sum_k d_{ij} s_{i,k} (s_{j,k+1} + s_{j,k-1})$$

$$(\text{V.3.2-2})$$

の様に与えられた場合でも、全く同様にIV.4.3で述べた方法を適用することができる。なお、(V.3.2-1)、(V.3.2-2)で示した形のエネルギー関数を選ぶことは、決して特殊なことではなく、巡回セールスマン問題やHitchcock問題において、既に用いられている[Asou88][Kamgar-Parsi90][Takeda86]。

また、システムの状態遷移には、通常、1ニューロン(スピン)ごとの試行変形を用いることが多いが、(V.3.2-1)のエネルギー関数を用いた場合、制約条件を満足している状態間の直接遷移が起きない様になっている。従って、もし、 θ_r の値が大きすぎると、制約条件を満たす状態(極小値)にトラップされやすくなり、コスト値の大きな解しか得られないことが多いと予想される。

V.3.3 制約条件満足度

本節では、(IV.4.3-3)の制約条件満足度を具体的に定義する。ニューロン系 $\{s_{i,k}\}$ の状態を ω_s で表す。状態 ω_s において、各制約条件 $\phi_r(\omega_s)=0$ が満たされている度合いを、0.0~1.0の実数値 $I_r(\omega_s)$ ($r=1, \dots, n_\theta$)で表わす。ただし、 $I_r(\omega_s)=1.0$ は、制約条件 $\phi_r(\omega_s)=0$ が完全に満たされていることを表わし、0.0に近づくほど満たしていないものとする。また、 $I_r(\omega_s)$ を要素とするベクトル $\{I_r(\omega_s)\}$ の1つの状態を ω_1 で表わし、すべての制約条件が満足された場合のベクトル $\{I_r(\omega_s)\}$ を、 ω_1^0 で表わす。 ω_1^0 は、各要素の値がすべて1.0の単位ベクトルである。 $I_r(\omega_s)$ として、次の $\{I_i^h(\{s_{i,k}\})\}$ ($i=1, \dots, N$), $\{I_k^v(\{s_{i,k}\})\}$ ($k=1, \dots, N$)を選ぶことにする。

$$I_i^h(\{s_{i,k}\}) = g \left[- \left(\sum_k s_{i,k} - 1 \right)^2 ; x_0^h, \rho^h \right] / g[0; x_0^h, \rho^h] \quad (V.3.3-1)$$

$$I_k^v(\{s_{i,k}\}) = g \left[- \left(\sum_i s_{i,k} - 1 \right)^2 ; x_0^v, \rho^v \right] / g[0; x_0^v, \rho^v] \quad (V.3.3-2)$$

ただし、 $g(x; x_0, \rho)$ は、シグモイド関数で、

$$g(x; x_0, \rho) \equiv \frac{1}{2} \left\{ \tanh\left(\frac{x - x_0}{\rho}\right) + 1 \right\}$$

で定義されている。(V.3.3-1),(V.3.3-2)は、 ω_s から ω_I への写像Rの具体例を表わしている。さらに、(IV.4.3-4)の $f(\omega_I^0, R(\omega_s))$ として、

$$f(\omega_I^0, R(\omega_s)) \equiv \frac{g(D; x_0^D, \rho^D) - g(0.0; x_0^D, \rho^D)}{g(1.0; x_0^D, \rho^D) - g(0.0; x_0^D, \rho^D)} \quad (\text{V.3.3-3})$$

$$\left(D(\omega_I^0, R(\omega_s)) \equiv \frac{\omega_I^0}{\|\omega_I^0\|^2} \cdot R(\omega_s), \quad 0 \leq D \leq 1.0 \right) \quad (\text{V.3.3-3'})$$

を用いる。(V.3.3-3')中の" \cdot "はベクトルの内積を、 $\|\cdot\|$ はベクトルのノルムを表わ

している。(V.3.3-1)~(V.3.3-3')を用いると、(IV.4.3-4)が具体的に計算できる。もし、 $x_0^D \rightarrow 1, \rho^D \rightarrow 0$ とすれば、0または1の2値の $P(\omega_I^0 / \omega_s)$ を用いた場合に相当する。

V.3.4 パラメータ更新ルール

(IV.4.3-9)に示されたパラメータ更新ルールを用いる。(IV.4.3-9)の右辺の $P(\omega_I^0 / \omega_s)$ や制約条件満足度 $\Pi(\omega_I^0)$ の計算には、(V.3.3-3)を用いる。

V.3.5 制約条件満足度の目標値の設定

制約条件満足度の目標値 $\Pi_0(T)$ としては、図IV.4.3-1に示した関数を用いる。従って、 $T_{\text{start}}, T_{\text{max}}, T_{\text{min}}$ の値を設定する必要がある。(V.3.2-1)より、1つのスピン s_{XY} を Δs_{XY} (-1または1)だけ変化させたときのエネルギー変化量は、

$$\Delta E_{XY} = \left[A \left(\sum_k s_{X,k} - 1 \right) + B \left(\sum_i s_{i,Y} - 1 \right) + \sum_i d_{iX} (s_{i,Y-1} + s_{i,Y+1}) \right] \Delta s_{XY} + \frac{1}{2} (A + B) \Delta s_{XY}^2 \quad (\text{V.3.5-1})$$

で与えられる。従って、

$$\left| \Delta E_{XY} (\{s_{i,k}\}; A = B = 0) \right| = \sum_i d_{iX} (s_{i,Y-1} + s_{i,Y+1}) \quad (\text{V.3.5-2})$$

となるので、(IV.4.3-10)と(IV.4.3-11)の右辺は次のように計算できる。

$$T_{start} = \max_{\{s_{i,k}\} \in \Omega_0} \max_{X,Y} \left| \sum_i d_{iX} (s_{i,Y-1} + s_{i,Y+1}) \right| \quad (\text{V.3.5-3})$$

$$\cong 2 \cdot \max_i \max_j d_{ij} \quad (\text{V.3.5-4})$$

$$T_{max} = \text{avr}_{\{s_{i,k}\} \in \Omega_0} \frac{1}{N^2} \sum_X \sum_Y \left| \sum_i d_{iX} (s_{i,Y-1} + s_{i,Y+1}) \right| \quad (\text{V.3.5-5})$$

$$= \frac{2}{N^2} \sum_i \sum_j d_{ij} \quad (\text{V.3.5-6})$$

T_{min} の計算においては、(IV.4.3-12)の右辺を厳密に評価することは難しい。しかし、状態 ω_s (可能解)からの試行変形としては $\Delta s_{XY}=1$ である場合が圧倒的に多く、このときには(V.3.5-1)から

$$\left| \Delta E_{XY} (\{s_{i,k}\}; A, B) \right| \geq \left| \Delta E_{XY} (\{s_{i,k}\}; A = B = 0) \right| \quad (\text{V.3.5-7})$$

が成り立つので、(IV.4.3-12)の右辺の下限は、次のように近似的に評価できる。

$$T_{min} \geq \frac{1}{2} \min_{\{s_{i,k}\} \in \Omega_0} \min_{X,Y} \left| \Delta E_{XY} (\{s_{i,k}\}; A = B = 0) \right| \quad (\text{V.3.5-8})$$

$$\approx \min_i \min_{j \neq i} d_{ij} \quad (\text{V.3.5-9})$$

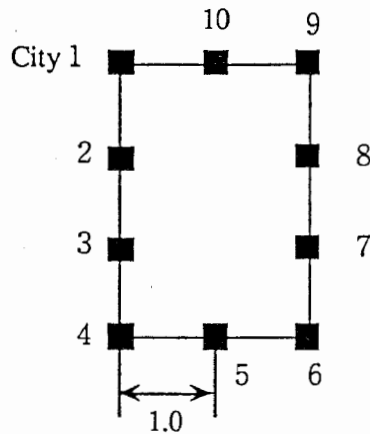
(V.3.5-9)は、 $\Delta s_{XY}=1$ となる場合の ΔE_{XY} の値を評価した式であるが、 E_{cost} の項だけから簡単に計算できるので、これを T_{min} の値として用いることにする。

V.3.6 全体の処理の流れ

IV.4.3に示した[処理フロー]にしたがって処理を行なう。具体的なアニーリングの温度スケジュールは次節で与える。

V.3.7 実験1

都市数(N)が10で、都市が図V.3.7-1のように、長方形の辺上に等間隔に配置された場合をここでは考える。図中、最近接の都市間距離は、すべて1.0とする。



図V.3.7-1. 実験1で用いた都市配置(N=10)

アニーリングの温度列 $\{T_i\} (i=0, \dots, n)$ は、次のように定めた。まず、 $T_0 = T_{\text{start}}$ とし、 T_{start} と T_{max} との間を (n_1+1) 等分、 T_{max} と T_{min} との間を (n_2+1) 等分、さらに、 T_{min} と $T=0$ との間を (n_3+1) 等分する。すなわち、

$\{T_i\} (i=1, \dots, n_1+n_2+n_3+2)$:

$$1) 0 \leq i \leq n_1 \text{ の場合} \quad T_i = T_{\text{start}} - (T_{\text{start}} - T_{\text{max}})i / (n_1 + 1) \quad (\text{V.3.7-1})$$

$$2) n_1 + 1 \leq i \leq n_1 + n_2 + 1 \text{ の場合} \quad T_i = T_{\text{max}} - (T_{\text{max}} - T_{\text{min}})(i - n_1 - 1) / (n_2 + 1) \quad (\text{V.3.7-2})$$

$$3) n_1 + n_2 + 2 \leq i \leq n_1 + n_2 + n_3 + 2 \text{ の場合} \quad T_i = T_{\text{min}} - T_{\text{min}}(i - n_1 - n_2 - 2) / (n_3 + 1) \quad (\text{V.3.7-3})$$

と定める。 T_s は、 $T_{\min} \leq T_s \leq T_{\max}$ となるように、

$$T_s = T_{\min} + (T_{\max} - T_{\min}) \cdot n_4 / (n_2 + 1) \quad (\text{V.3.7-4})$$

と定めた。今回の実験では、上記の (n_1, n_2, n_3, n_4) の値としては、 $(n_1, n_2, n_3, n_4) = (5, 20, 5, 5)$ を用いた。

また、(V.3.3-1),(V.3.3-2)での定数は、 $x_0^h = x_0^v = -0.1$ 、 $\rho^h = \rho^v = 0.1$ とし、(V.3.3-3)での定数は、 $x_0^D = 0.9$ 、 $\rho^D = 0.15$ に固定した。熱平衡状態の実現には、メトロポリス法を用いた。システムのすべてのニューロンに対して、状態遷移を試行することを1回のスキャンと称すれば、step3とstep4での毎回のスキャン回数 N_{flopp} は、 $N_{\text{flopp}} = 50$ 回とした。step5でのstep3とstep4の繰り返し回数 N_{update} は、 $N_{\text{update}} = 40$ 回とした。十分な量だけパラメータを更新させるために、(IV.4.3-9)の左辺の時間幅 $\Delta t_i (i=1, \dots, N_{\text{update}})$ は一定ではなく、付録Dに示したように、毎回、計算により与えた。なお、今回は探索空間を少しでも小さくするために、 $s_{1,1} = 1$ と固定することにより、基底状態の縮退数を減らしている。

パラメータA,Bの初期値 A_0, B_0 は、 $A_0 = B_0 = 0, 5, 10, 15, 20, 25, 30$ の7通りに設定し、

- (i) A,Bの値を初期値に固定した場合と、
- (ii) IV.4.3で示したアルゴリズムを用いて更新した場合

との結果を、表V.3.7-1に示す。

表V.3.7-1では、(i)でアニーリングが収束した先の状態 ω_s^{end} のコスト（経路の総距離）を L_{end}^0 で、 $T \leq T_s$ 以下で発見された解 ω_s （可能解）の中で最小のコスト値を持つ解 ω_s^{min} のコスト値を L_{min}^0 で表わしている。ただし、“---”は ω_s となる状態が出現しなかったことを表わしている。また、これらの L_{end}^0 、 L_{min}^0 に対応する値を、(ii)の場合では、それぞれ、 L_{end} 、 L_{min} で表わしている。厳密な最適解と一致している場合は、下線を施して示してある。さらに、 L_{min}^0 が発見されたときの温度を $T_{\text{sol}} (\leq$

T)で、最終的なパラメータの値を A_{end} と B_{end} で表わしている。なお、(i),(ii)では、トータルのスキャン回数を等しくしてある。

	(i)A,Bを固定した場合		(ii)A,Bを更新した場合			
$A_0=B_0$	L_{end}^0	$L_{\text{min}}^0 (T_{\text{sol}}^0)$	L_{end}	$L_{\text{min}} (T_{\text{sol}})$	A_{end}	B_{end}
0.0	---	---	11.41	<u>10.0</u> (1.26)	9.67	11.09
5.0	11.41	<u>10.0</u> (1.13)	13.89	<u>10.0</u> (1.26)	9.43	11.05
10.0	14.83	<u>10.0</u> (1.53)	15.12	<u>10.0</u> (1.26)	9.79	10.39
15.0	15.91	13.41(1.66)	12.00	<u>10.0</u> (1.53)	9.80	10.48
20.0	15.22	15.23(1.53)	14.40	<u>10.0</u> (1.53)	10.61	10.40
25.0	17.05	17.05(1.66)	15.26	<u>10.0</u> (1.13)	9.62	10.95
30.0	22.12	22.12(1.66)	<u>10.0</u>	<u>10.0</u> (1.66)	10.32	9.76

表V.3.7-1 実験1の結果

注) $A_0=B_0$: パラメータA,Bの初期値。

$L_{\text{end}}^0, L_{\text{end}}$: アニーリングの収束先の状態が与える総距離。"---"は、その状態が制約条件を満たしていないことを表わし、下線は最適解であることを示している。

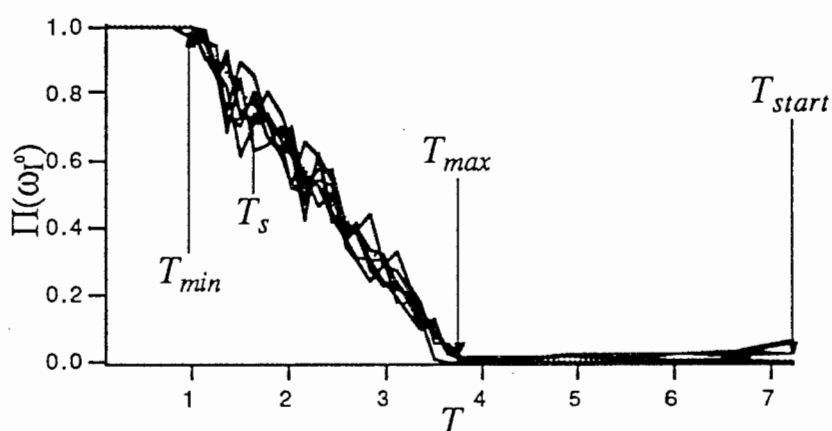
$L_{\text{min}}^0, L_{\text{min}}$: $T \leq T_s$ で出現した解の中での最短の総距離。"---"は、制約条件を満たす解が出現しなかったことを表わし、下線は最適解であることを示している。

$T_{\text{sol}}^0, T_{\text{sol}}$: $L_{\text{min}}^0, L_{\text{min}}$ の解が最初に発見されたときの温度。

$A_{\text{end}}, B_{\text{end}}$: アニーリング終了時のA,Bの値。

表V.3.7-1からわかるように、パラメータA,Bを固定した場合では、パラメータの値が小さすぎる($A_0=B_0=0$)と、制約条件を満足する解が出現しなくなる。逆に、大きすぎる($A_0=B_0=20,25,30$)と、コスト値の大きな解しか得られない。従って、A,Bの適切な値の範囲は、5.0~15.0であろうと推測される。一方、IV.4.3で提案した方法でA,Bの値を調整していくと、A,Bの初期値によらずに最適解(コスト=10.0)を得ることができた。最終的なA,Bの値($A_{\text{end}}, B_{\text{end}}$)も、A,Bの適切な値として(i)から推定された範囲(5.0~15.0)に入っており、適切な値に自動的に調整されたと言うことができる。

また、図V.3.7-2に、(ii)の7通りの場合について、アニーリング過程で観測された制約条件満足度 $\Pi(\omega_i^0; A, B, T)$ の値を示す。これらの値は、各温度 T における最終回のパラメータ更新時($N_{update}=40$ 回目の更新時)に、観測された $\Pi(\omega_i^0; A, B, T)$ である。図V.3.7-2から、たとえ初期値 $A_0=B_0$ が異なっても、実際に観測される制約条件満足度は、目標と定めた曲線 $\Pi_0(T)$ (図V.3.7-2中には、点線で示されている)に充分沿って変化しており、(IV.4.3-9)の更新ルールはねらいどおりの機能を果たしていることがわかる。

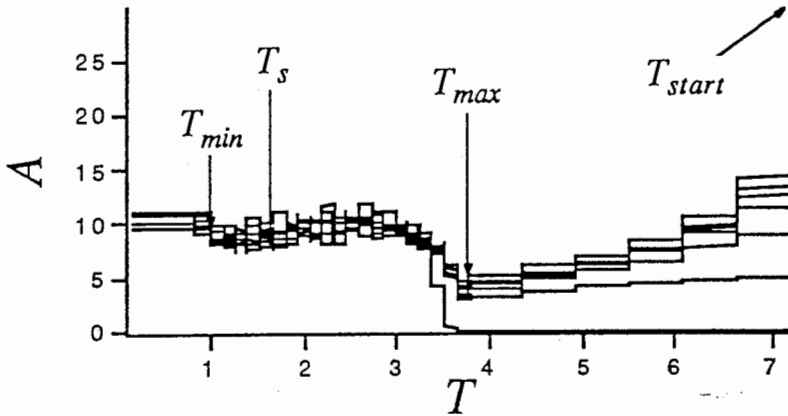


図V.3.7-2 実験1でパラメータを更新させた場合の、制約条件満足度の値の変化。

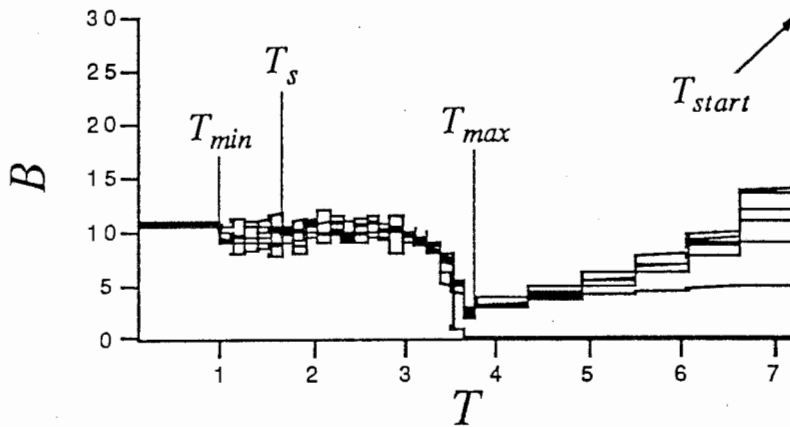
図V.3.7-3と図V.3.7-4には、パラメータ A, B の値が更新されていく様子をそれぞれ示した。(ii)の7通りの場合について、各温度で40回更新されていった結果を重ね合わせてある。これらの図からわかるように、たとえパラメータの初期値が大きな値に設定されていても、 T_{max} 付近までには、小さな値に減少させられて、それ以降は大きくなり、制約条件項が影響を持ち始めているのがわかる(少なくとも T_{max} 付近では)。

また、パラメータの初期値に依存しないで、ある共通の値に収束して行く傾向が見えるのは、本方法がパラメータに関する最急降下法を用いているにもかかわらず、結果がパラメータの初期値にあまり依存していないことを表している。もし、(IV.4.3-3')の2値の $P(\omega_i^0/\omega_s)$ を用いると、 $\partial\Pi(\omega_i^0; \{\theta_r\}, T)/\partial\theta_r \geq 0$ が成り立つ

ことから $\Pi(\omega_1^0; A, B, T)$ は A, B の関数として極小値をもちにくいことが予想される。
 なお、費やされた計算時間は、(ii)の場合、Sun Sparc2で約40分程度であった。



図V.3.7-3. 実験1でパラメータを更新させた場合の、パラメータAの値の変化

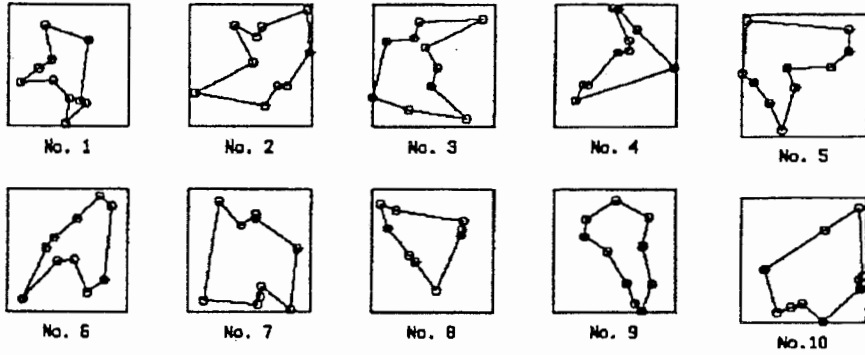


図V.3.7-4. 実験1でパラメータを更新させた場合の、パラメータBの値の変化

V.3.8 実験2

別の実験として、一辺の長さが1.0の正方形の内部にランダムに都市(N=10)が配置された問題を考えた。パラメータA,Bの初期値として $A_0=B_0=0$ を使い、実験1の(ii)と同じように、A,Bの値を更新させながらアニーリングを行なう実験を行なっ

た。実験条件は、実験1と全く同様に設定した。図V.3.8-1に示した10種類の都市配置に対する実験結果を表V.3.8-1にまとめた。



図V.3.8-1 実験2 で用いた都市配置(N=10)と最適解.

No.	T_{\min}	T_s	T_{\max}	T_{start}	L_{end}	$L_{\min}(T_{\text{sol}})$	A_{end}	B_{end}
1	0.058	0.217	0.726	1.672	2.874	<u>2.491</u> (0.154)	1.242	1.544
2	0.078	0.276	0.910	2.273	<u>3.091</u>	<u>3.091</u> (0.197)	1.454	1.753
3	0.120	0.317	0.948	2.223	4.055	3.463(0.238)	1.701	2.327
4	0.041	0.223	0.803	1.705	2.740	<u>2.578</u> (0.223)	1.016	1.906
5	0.123	0.325	0.972	1.975	4.300	<u>3.078</u> (0.204)	1.837	2.217
6	0.107	0.287	0.861	2.111	3.691	2.852(0.215)	1.692	1.988
7	0.032	0.256	0.971	2.115	3.347	3.060(0.211)	1.199	1.715
8	0.004	0.202	0.838	1.698	2.459	<u>2.183</u> (0.083)	0.696	1.091
9	0.091	0.278	0.877	1.861	<u>2.340</u>	<u>2.340</u> (0.166)	1.094	1.408
10	0.038	0.258	0.961	2.118	3.338	<u>2.738</u> (0.170)	1.166	1.915

表V.3.8-1 実験2 の結果

注) T_{\min} , T_s , T_{\max} , T_{start} : 図IV.4.3-1に示した温度の設定値。

L_{end} , L_{\min} , T_{sol} , A_{end} , B_{end} : 表V.3.7-1と同様。

また、No.3、No.6、No.7における厳密な最適解の総距離は、それぞれ、3.437、2.829、3.054である。

表V.3.8-1で、 L_{\min} の値に下線が施されている解は、厳密な最適解と一致していることを表している。10種類の都市配置のうち、7種類の都市配置に対して最適解を発見することができた。また、残りの3種類の都市配置に関しても、最適解にかなり近い解が得られている。

V.3.9 考察

実験 1 と実験 2 では、都市数は同じであるが、都市間の距離が少し異なるので、パラメータ A, B の適切な値も、当然、異なってくる。実際、実験 1 の(ii)で得られた $A_{\text{end}}, B_{\text{end}}$ の値は、実験 2 で得られた $A_{\text{end}}, B_{\text{end}}$ の値の、5~15倍である。従って、もし何らかの更新ルールを用いないとすると、実験 2 の問題をシミュレーテッド・アニーリングで解く場合には、実験 1 の問題で用いたパラメータ A, B の値をそのまま用いるわけにはいかない。試行錯誤で求めようにも、実験 2 の問題は実験 1 の問題と異なり、あらかじめ厳密解を知ることが難しく、パラメータの適切な値を求めるのは容易ではない。しかし、IV.4.3で示したアルゴリズムを用いると、実験 1、2、共に、最適解またはコスト値がそれに近い解を発見することができた。

したがって、本アルゴリズムは、10都市の巡回セールスマン問題のような比較的小規模の組合わせ最適化問題においては、最適解またはそれに近い準最適解を発見できる能力が十分にあると結論できる。しかし、大規模な組合わせ最適化問題においては、本アルゴリズムのように確率的なモデルを用いることには、計算時間の点で問題がある。そこで、次節(V.4)では、平均場近似を用いた決定論的なモデルにおいても、本アルゴリズムで行なったようなパラメータの自動調節が可能であるかを検証する。

V.4 巡回セールスマン問題への応用(II) - 平均場近似 -

V.4.1 背景

IV.4.2で述べたように、Hopfield-Tankの定式化[Hopfield85]は、組合わせ最適化問題の解法として、より一般性がある。エネルギー関数は、弾性ネット上のノードの座標($\{Y_j\}$)という様な、巡回セールスマン問題特有な変数ではなく、0から1の間の実数値をとる一般的なニューロン変数の関数として記述されている。しかし、Hopfieldらの方法には2つの欠点がある。その1つは、ニューロンの状態遷移に一種の降下法を用いているために、エネルギー関数の極小解にトラップされ易いという欠点である。第2の欠点は、エネルギー関数中の重み係数の値を適切に決定するのが難しいことである。

第1の欠点を改善する方法としては、アナログニューロンのかわりに0または1の値をとる2値ニューロン系を考えて、エネルギー関数の最小状態をシミュレートドアニーリング法により求めることが考えられる。しかし、計算時間の点から難点があり、そこで、2値ニューロン系に対して平均場近似を用いることが考えられる。実際、Hopfieldらのモデルは平均場近似により、ある一定の温度で、系の自由エネルギーを極小にするニューロンの統計平均値(アナログ値)を、self-consistentな方程式の解として求めていることと等価である(次節V.4.2参照)。このときの系の温度が、ニューロンの入出力関数に用いられたsigmoid関数の傾きに対応し、アニーリングを行なうことは、この傾きを徐々に大きくしていくことに相当する。II.2でも述べたが、この方法は、"決定論的アニーリング法"(deterministic annealing method)、または、"平均場アニーリング法"(mean field annealing method)と呼ばれている。

第2の欠点であるエネルギー関数中の重み係数の値の決定法については、温度が0となる極限で、すべての実行可能解(feasible solution; すべての都市を一度づつ

経路して出発点に戻ってくる経路を表わしている解)がエネルギー関数の極小状態となるための条件から、拘束条件項の重み係数の上限値を求める方法がある [Nonaka92],[Abe91]。しかし、これらの方法を、任意のエネルギー関数に対して (特に、2次関数以外の関数に) 適用できるかどうかということや、重み係数の個数が多い場合に、すべての重み係数に対して適切な値を決定するための十分な情報が得られるかという疑問が残る。また、この上限値を初期値として用いる2分探索法や、拡大ペナルティ関数を導入する方法(乗数法)などが提案されている [Oohori91][Oohori92]。しかし、それらの方法では、重み係数の更新方法が十分に理論的とはいいがたく、また、アニーリングを行なっておらず、第1の欠点を改善していない。

上記の2つの欠点を同時に解決する方法として、シミュレーテッドアニーリングを行ないながら、重み係数の値を適切に調節していく、2層確率場モデルを用いた方法を前節(V.3)では試みた。この方法では、まず、重み係数の値がどの程度実行可能解を出現させているかという目安を与える、"制約条件満足度"を定義した。次に、この制約条件満足度の各温度での目標値を設定し、実際の値との相違量を減少させるために最急降下法を用い、重み係数の値に関する更新ルールを導出した。その更新ルールに基づいて、アニーリング操作を行ないながら、重み係数の値を適切なものに調節して行った。ただし、そこで考えられていたニューロン系は、0または1の2値ニューロン系であった。しかし、計算時間の点からは、平均場近似を施して決定論的アニーリングを行なうのが望ましい。

そこで、本節(V.4)では、2層確率場モデルを構成する2値ニューロン系に対して平均場近似を適用し、決定論的アニーリングを行ないながら、重み係数の値を適切に調節することを試みた。対象とする都市数も前回(V.3)の10から64と増やし、使用計算機も前回のワークステーション(SUN Sparc2)から、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)にかえて、大規模な問題を取り扱った。

V.4.2 平均場近似とアニーリング

V.3では、都市数を N 、2値ニューロン変数を $s_{i,k}$ とにおいて、都市 i を k 番目に訪問することを $s_{i,k} = 1$ 、訪問しないことを $s_{i,k} = 0$ で表わした。また、系のエネルギーを、(V.3.2-1)のように定義した。V.3では、2値ニューロン系を確率的なモデルとして取り扱ったが、本節では、II.2で述べたような平均場近似を施す。

その結果、2値ニューロンの場合には、ニューロンの出力状態 $P(s_{i,k}=1)(p_{i,k}$ で表すと内部状態 $u_{i,k}$ との入出力関係(II.2-11)は、次の(V.4.2-1)で表され、(II.2-8)の自由エネルギー F_{mf} の極小状態を繰り返し計算で求める式(II.2-13)は、次の(V.4.2-2)で表される。

$$\begin{cases} p_{i,k} = g_0(u_{i,k}; T) & (V.4.2-1) \\ \tau \frac{du_{i,k}}{dt} = -u_{i,k} + \left[\sum_j \sum_l W_{ij,kl} p_{j,l} + Q \right] & (V.4.2-2) \end{cases}$$

ただし、

$$W_{ij,kl} \equiv -A\delta_{i,j} - B\delta_{k,l} - d_{i,j}(\delta_{l,k+1} + \delta_{l,k-1}) \quad (V.4.2-3)$$

$$Q \equiv A + B \quad (V.4.2-4)$$

$$g_0(u; T) \equiv \frac{1}{1 + e^{-u/T}} \quad (V.4.2-5)$$

である。(V.4.2-5)より、温度 T が sigmoid 関数の傾きに相当しており、 $T \rightarrow 0$ で、 $u_{i,k}$ の符号により、 $p_{i,k}$ は0または1のいずれかに近づいて行くことがわかる。温度 T を徐々に下げていくことにより、(V.4.2-1),(V.4.2-2)の解は、平均場近似の範囲内で、エネルギー関数 E の最小状態に近づいて行くと期待される(決定論的アニーリング法)。

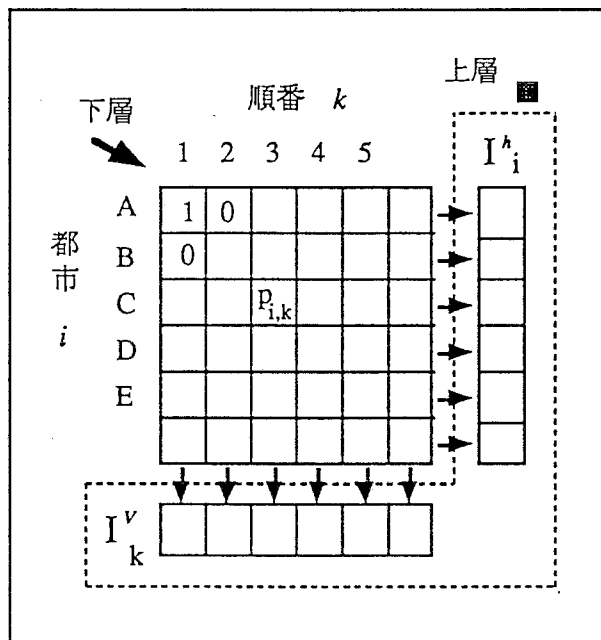
また、2値ニューロンの場合には、(II.2-12),(V.4.2-1)から

$$\frac{dF_{mf}}{dt} = \sum_{i,k} \frac{\partial F_{mf}}{\partial p_{i,k}} \frac{dp_{i,k}}{dt} = -\sum_{i,k} \left(\frac{\partial F_{mf}}{\partial p_{i,k}} \right)^2 \frac{dg_0(u_{i,k}; T)}{du_{i,k}} \leq 0 \quad (\text{V.4.2-6})$$

が成り立ち、自由エネルギーに対する降下法であることがわかる。したがって、(V.4.2-1), (V.4.2-2)の解は平均場近似で得られる自由エネルギー F_{mf} の極小解である。

V.4.3 平均場近似が適用された2層確率場モデル

アナログニューロン系 $\{p_{i,k}\}(i=1,\dots,N, k=1,\dots,N)$ を2層確率場モデルの下層とする。上層のニューロン I_i^h, I_k^v もV.3と同様に(V.3.3-1)と(V.3.3-2)で与えられるとする。ただし、 $s_{i,k}$ は $p_{i,k}$ で置き換える。2層確率場モデルの様子を図V.4.3-1に示す。



図V.4.3-1 巡回セールスマン問題に適用された2層確率場モデル

V.4.4 パラメータ更新ルール

(IV.4.3-5)に対応して、次の関数 U_{err} を定義する。

$$U_{err} \equiv \frac{1}{2} \{ \Pi_0(T) - \Pi(\bar{\omega}_s; A, B, T) \}^2 \quad (V.4.4-1)$$

$\bar{\omega}_s$ は、温度 T における(V.4.2-1), (V.4.2-2)の収束値 $\bar{\omega}_s = (\{ \bar{p}_{i,k} \}, \{ \bar{u}_{i,k} \})$ を表している。

温度 T において、この U_{err} を減少させるようなパラメータ A, B の更新ルールを、最急降下法を用いて導出する。すなわち、パラメータ A, B を $\{ \theta_r \}$ ($r=1, 2, \theta_1=A, \theta_2=B$)で表わすと、更新ルールは、

$$\frac{d\theta_r}{dt} = - \frac{\partial U_{err}}{\partial \theta_r} \quad (V.4.4-2)$$

$$= - \{ \Pi_0(T) - \Pi(\bar{\omega}_s) \} \cdot \frac{\partial \Pi(\bar{\omega}_s)}{\partial \theta_r} \quad (V.4.4-3)$$

となる。以下、(V.3.3-1)~(V.3.3-3')から、

$$\frac{\partial \Pi(\bar{\omega}_s)}{\partial \theta_r} = \frac{g'(D; x_0^D, \rho^D)}{g(1.0; x_0^D, \rho^D) - g(0.0; x_0^D, \rho^D)} \cdot \frac{\partial D}{\partial \theta_r} \quad (V.4.4-4)$$

$$\left[g'(X; x_0, \rho_0) = \frac{2}{\rho_0 [e^{(X-x_0)/\rho_0} + e^{-(X-x_0)/\rho_0}]^2} \right] \quad (V.4.4-5)$$

$$\frac{\partial D}{\partial \theta_r} = \frac{1}{N} \cdot \left(\sum_i \frac{\partial I_i^h}{\partial \theta_r} + \sum_k \frac{\partial I_k^v}{\partial \theta_r} \right) \quad (V.4.4-6)$$

$$\frac{\partial I_i^h}{\partial \theta_r} = - \frac{2g'(\{ \bar{p}_{i,k} \}; x_h, \rho_h)}{g(0; x_h, \rho_h)} \cdot \left(\sum_k \bar{p}_{i,k} - 1 \right) \sum_k \frac{\partial \bar{p}_{i,k}}{\partial \theta_r} \quad (V.4.4-7)$$

$$\frac{\partial I_k^v}{\partial \theta_r} = - \frac{2g'(\{ \bar{p}_{i,k} \}; x_v, \rho_v)}{g(0; x_v, \rho_v)} \cdot \left(\sum_i \bar{p}_{i,k} - 1 \right) \sum_i \frac{\partial \bar{p}_{i,k}}{\partial \theta_r} \quad (V.4.4-8)$$

が成り立つ。

そこで、 $\partial \bar{p}_{i,k} / \partial \theta_r$ をどう計算するかが問題となる。ここでの $\{\bar{p}_{i,k}\}$ は、ある温度 T で、自由エネルギー F を極小にする状態であるので、(V.4.2-2) に $du_{i,k}/dt=0$ を代入した式、

$$\bar{u}_{i,k} = \sum_j \sum_l W_{ij,\mu} \bar{p}_{j,l} + Q \quad (\text{V.4.4-9})$$

と(V.4.2-1)とを満たす。(V.4.2-1)の両辺に $\partial / \partial \theta_r$ を作用させると、

$$\frac{\partial \bar{p}_{i,k}}{\partial \theta_r} = g'_0(\bar{u}_{i,k}; T) \frac{\partial \bar{u}_{i,k}}{\partial \theta_r} \quad (\text{V.4.4-10})$$

を得る。(V.4.4-9)の両辺に $\partial / \partial \theta_r$ を作用させ[Pineda87]、(V.4.4-10)の右辺に代入すると、

$$\frac{\partial \bar{p}_{i,k}}{\partial \theta_r} = g'_0(\bar{u}_{i,k}; T) \left[\sum_j \sum_l \left(W_{ij,\mu} \frac{\partial \bar{p}_{j,l}}{\partial \theta_r} + \frac{\partial W_{ij,\mu}}{\partial \theta_r} \bar{p}_{j,l} \right) + \frac{\partial Q}{\partial \theta_r} \right] \quad (\text{V.4.4-11})$$

となる。これは、 $\partial \bar{p}_{i,k} / \partial \theta_r$ に関する連立一次方程式であるが、次の様に、繰返し計算で求めることにする。

$$\begin{aligned} \tau_\theta \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial \bar{p}_{i,k}}{\partial \theta_r} \right] = & -\frac{\partial \bar{p}_{i,k}}{\partial \theta_r} + g'_0(\bar{u}_{i,k}) \left[-A \sum_l \frac{\partial \bar{p}_{i,l}}{\partial \theta_r} - B \sum_j \frac{\partial \bar{p}_{j,k}}{\partial \theta_r} - \sum_j d_{i,j} \left(\frac{\partial \bar{p}_{j,k+1}}{\partial \theta_r} + \frac{\partial \bar{p}_{j,k-1}}{\partial \theta_r} \right) \right] \\ & + g'_0(\bar{u}_{i,k}) \cdot V(\bar{\omega}_r; i, k, \theta_r) \end{aligned} \quad (\text{V.4.4-12})$$

$$V(\bar{\omega}_r; i, k, \theta_r) = \begin{cases} \left(1 - \sum_l \bar{p}_{i,l} \right) & \text{if } \theta_r = A \\ \left(1 - \sum_j \bar{p}_{j,k} \right) & \text{if } \theta_r = B \end{cases} \quad (\text{V.4.4-13})$$

また、(V.4.4-1)の $\Pi_0(T)$ は、V.3.5で述べた関数を用いた。

V.4.5 巡回路検出処理

II.2で述べたように、 $T \rightarrow 0$ では、各ニューロンは、0または1の値に近づくが、(V.4.2-1)からわかるように、sigmoid関数はステップ関数に近くなり、ニューロンの内部状態 u_{ik} が0付近では、出力状態 p_{ik} が大きく変化し、収束しにくくなる。適当な回数で状態遷移を打ち切ることにしても、総経路長の短い実行可能解が得られにくいことが多い。そこで、ある温度 T_c 以下では、アナログニューロン系の状態 ω_s から、適当な2値化処理を施して、実行可能解(巡回路)を発見する処理を、(V.4.2-1),(V.4.2-2)による状態更新が収束した後に行なうことにする。

具体的な、巡回路の検出の方法としては、次のものを考えた。以下では、 $\{s'_{ik}\}$ を0または1の2値をとる行列、都市 i の順番を $o(i)$ で表わす。ただし、 $o(i)$ は任意の実数値をとるものとする。

【巡回路検出処理】

- step1: ある閾値 Th_2 を設定し、 $p_{ik} < Th_2$ ならば、 $s'_{ik}=0$ とする。
- step2: $\{s'_{ik}\}$ において、すべての要素が0である行または列が存在すれば、現在の系の状態 $\{p_{ik}\}$ からは巡回路が検出できないと判定し、終了する。
- step3: $\{p_{ik}\}$ の各列 k で p_{ik} が最大値をとる i を、 $i(k)$ で表わす。 $s'_{i(k),k}=1$ とし、 $i \neq i(k)$ では $s'_{ik}=0$ とする。したがって、 $\{s'_{ik}\}$ の各列は、1である要素は列内にはただ1つである。
- step4: ある i に対して、複数の s'_{ik} が1であれば、それらの内で、 p_{ik} が最大のものだけを残して、他の s'_{ik} は0とする。よって、 $\{s'_{ik}\}$ の各行も、1である要素は行内ではただ1つとなっている。
- step5: 各都市 i について、 $s'_{ik}=1$ ならば $o(i)=k$ とおく。
- step6: ある i に対して、どの s'_{ik} も0であるような都市 i の集合を Ω_0 とおく。各 $i(i \in \Omega_0)$ について、 $p_{i,k(i)} = \max_k p_{ik}$ となる $k(i)$ を求める。
- step7: もし $p_{i,k(i)-1} \geq p_{i,k(i)+1}$ ならば $k_s=k(i)-1$ 、 $k_e=k$ 、そうでなければ、 $k_s=k$ 、 $k_e=k(i)+1$ とおく。
- step8: 都市 $i(i \in \Omega_0)$ の順番 $o(i)$ は、区間 $[k_s, k_e]$ 内のアナログ値を用いて以下のように定める。区間 $[k_s, k_e]$ に順番 o が属するすべての都市 $i(i \in \Omega_0)$ を $\{i_n\}$ ($n=1, \dots, n(k_s, k_e)$)

とする。 $o(i_s)=k_s$, $o(i_e)=k_e$ となる都市 i_s , i_e と、都市 $\{i_n\}$ に対して、 i_s を始点、 i_e を終点とする経路を greedy 法（残りの都市のうちで、最も近いものを結んで行く方法）により求める。

step9: $o(i_s)$ と $o(i_e)$ との間を、 $n(k_s, k_e)$ 等分し、 step8 で求めた経路に沿って、これらの値を割り当てて、都市 $\{i_n\}$ の順番 $\{o(i_n)\}$ とする。

step10: 順番 $\{o(i)\}$ ($i=1, \dots, N$) を上昇順に並べると、巡回路が求まる。

[処理終了]

step3-5では、 $\{p_{i,k}\}$ の各行各列での最大値を見つけることにより、都市に順番を割り振っている。この方法で順番が割り振れなかった都市については、step6-9で、各都市の $\{p_{i,k}\}$ が最大になる順番の前後の順番の $p_{i,k}$ の値を比較して、最も可能性のある経路上の地点に挿入するという処理を行なっている。もし、挿入すべき都市へ割り振る順番が互いに重複するようであれば、それらの都市の間では、greedy法を用いて順番を決定することになっている。

V.4.6 全体の処理の流れ

2層確率場モデルに平均場近似を適用して、最適解を求めるための、全体の処理の流れを以下に示す。

【全体の処理の流れ】

step1: アニーリング温度列 $\{T_i\}$ ($i=0, \dots, n; T_0=T_{start}$) と、 T_{start} , T_{max} , T_{min} , T_s の値を設定する。

step2: 重み係数 A, B と系の状態 ω_s を初期設定する。

step3: (V.4.2-1), (V.4.2-2) によりニューロンの状態を遷移させ、収束先の状態 $\bar{\omega}_s$ を求める。

step4: $T_i \leq T_s$ ならば巡回路検出処理を行なう。

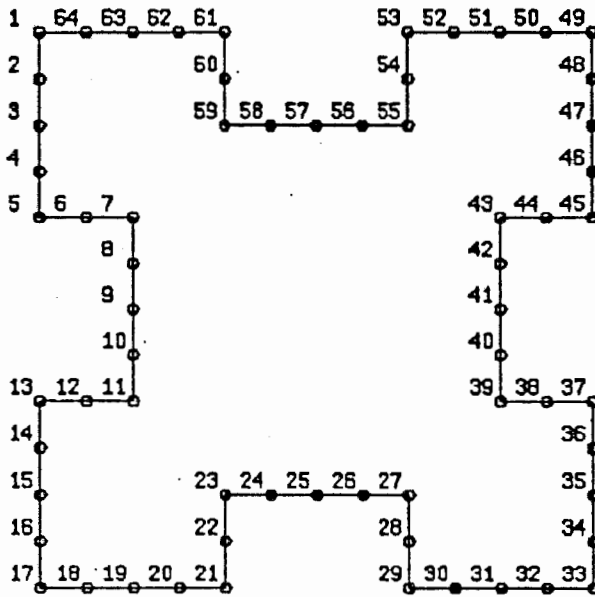
step5: $\bar{\omega}_s$ を用いて、(V.4.4-12)により、 $\{\partial p_{i,k} / \partial A\}$, $\{\partial p_{i,k} / \partial B\}$ の値を計算する。

- step6:上記の値を用いて、(V.4.4-3)~(V.4.4-8)により、重み係数A,Bの値を更新する。
 step7:A,Bが収束するまで、step3~step6を繰り返す。
 step8: $i \leftarrow i+1, T \leftarrow T_i$ とする。
 step9:if $i \leq n$ then step3 へ戻る。
 step10: step4で得られた巡回路(実行可能解)の中で、最も総経路長の短い経路を求め。
 [処理終了]

V.4.7 実験 -64都市の問題-

都市数(N)が64で、都市が図V.4.7-1のように配置された場合をここでは考える。

図中、最近接の都市間距離は、すべて1.0とする。



図V.4.7-1. 実験で用いた都市配置(N=64)

V.4.7.1 実験条件

アニーリングの温度列 $\{T_i\} (i=0, \dots, n)$ は、次のように定めた。まず、 $T_0 = T_{start}$ とし、 T_{start} と T_{max} との間を (n_1+1) 等分、 T_{max} と T_{min} との間を (n_2+1) 等分、さらに、 T_{min} と $T = T_n$

との間を (n_3+1) 等分する。 T_s は、 T_n から (n_4-1) 番目の温度で、 $T_{\min} \leq T_s \leq T_{\max}$ となるように n_4 を定める。今回の実験では、上記の (n_1, n_2, n_3, n_4) の値として、 $(n_1, n_2, n_3, n_4) = (10, 50, 20, 30)$ を用いた。平均場近似を用いないV.3の実験では、 $(n_1, n_2, n_3) = (5, 20, 5)$ であった。今回は極小値から逃れ出るメカニズムがないので、これよりも温度ステップを細かくすることにより良質の解を得るようにした。ここで、アニーリングの最終温度 $T_n = 0.001$ とし、V.3と同様に、 $T_{\text{start}} = 2 \cdot \max d_{ij} (= 33.9)$, $T_{\text{max}} = (2/N^2) \sum_i \sum_j d_{ij} (= 16.1)$, $T_{\min} = \min_{i \neq j} d_{ij} (= 1.0)$ と設定した。

また、(V.3.3-1),(V.3.3-2)での定数は、 $x_h = x_v = -0.1$, $\rho_h = \rho_v = 0.1$ とし、(V.3.3-3)での定数は、 $x^D_0 = 0.5$, $\rho^D = 0.15$ に固定した。

自由エネルギーFの極小値を繰返し計算で求める(V.4.2-1),(V.4.2-2)では、繰返しの最大回数を200回とし、 $\tau = 50$ 、時間幅 $\Delta t = 1.0$ と設定した。ただし、ニューロンの出力状態 p_{ik} の初期値はすべて0.5とし、さらに、探索空間を少しでも小さくするために、 $p_{1,1} = 1$ と固定することにより基底状態の縮退数を減らしている(V.4.6のstep3)。

また、巡回路検出処理(V.4.5のstep1)での閾値は $Th_2 = 0.1$ 、(V.4.4-12)での最大繰返し回数は100回とし、 $\tau_\theta = 10$ 、時間幅 $\Delta t = 1.0$ と固定した(V.4.6のstep5)。なお、(V.4.4-3)での時間幅 Δt_s は、V.3(付録D)と同じく、毎回のパラメータ値の変化量ができるだけ均等になるように自動的に調節している(V.4.6のstep6)。今回は、パラメータ値の更新回数は、最大で100回とした(V.4.6のstep7)。

シミュレーションには、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)を用いた。

V.4.7.2 実験結果

パラメータA,Bの初期値 A_0, B_0 を、 $A_0 = B_0 = 5, 10, 15, 20, 25, 30$ の6通りに設定し、

(i) A,Bの値を初期値 A_0, B_0 に固定した場合と、(ii)V.4.6で示したアルゴリズムを用いて更新した場合との結果を、表V.4.7.2-1に示す。

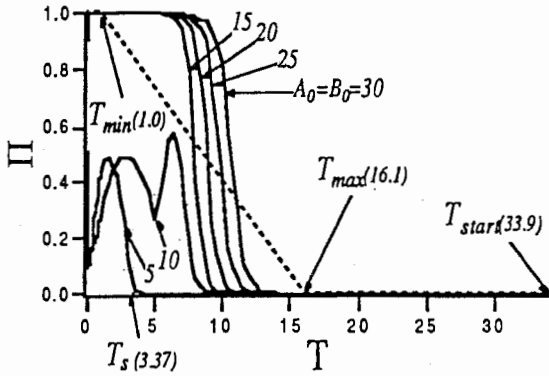
	(i) A,Bを固定した場合			(ii) A,Bを更新した場合				
$A_0=B_0$	L_{end}	L_{min}	(T_{sol})	L_{end}	L_{min}	(T_{sol})	A_{end}	B_{end}
5.0	---	---	(---)	---	<u>64.0</u>	(1.592)	13.92	10.75
10.0	---	---	(---)	---	<u>64.0</u>	(1.592)	13.03	10.71
15.0	---	65.4	(0.191)	---	<u>64.0</u>	(1.887)	6.68	10.52
20.0	---	69.2	(0.952)	---	79.1	(0.096)	6.71	10.64
25.0	---	69.3	(0.239)	---	<u>64.0</u>	(1.592)	7.58	10.31
30.0	---	83.4	(0.191)	---	<u>64.0</u>	(1.592)	7.21	9.79

表V.4.7.2-1 実験の結果

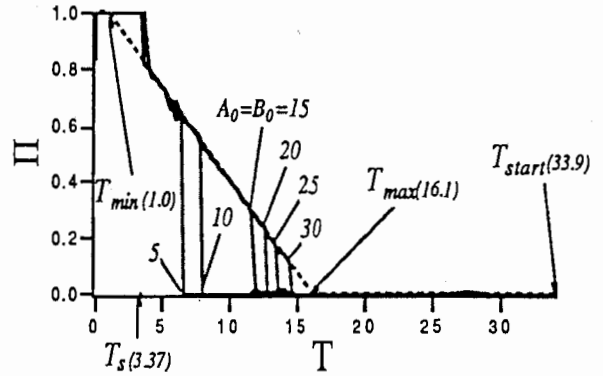
表1で、 L_{end} は、アニーリングが収束した先の状態のコスト（経路長）を表わしているが、今回はアニーリングの最終状態として実行可能解を得ることができなかった。エネルギー関数から自乗項を除くことや[Akiyama90]、0または1に収束するための制約項を付加するなどの処理が必要であろう。また、 $T \leq T_c$ でV.4.5に示した巡回路検出処理により検出された巡回路の中で、最小の経路長を与える巡回路の経路長の値を L_{min} で表わしている。ただし、“---”は巡回路が検出できなかったことを表わしている。 L_{min} が厳密な最適解のもつコスト(64.0)と一致する場合は、下線が施されている。さらに、 L_{min} が最初に発見されたときの温度を $T_{sol}(\leq T_c)$ で、最終的なパラメータの値を A_{end} と B_{end} で表わしている。

表V.4.7.2-1からわかるように、パラメータA,Bを固定した場合には、パラメータの値が小さすぎる($A_0=B_0 \leq 10.0$)と、制約条件を満足する実行可能解(巡回路)が巡回路検出処理によって検出されない。逆に、大きすぎる($A_0=B_0 \geq 15.0$)と、コスト値の大きな巡回路しか検出されない。一方、V.4.6で提案した方法でA,Bの値を調整していくと、 $A_0=B_0=20.0$ の場合を除いて、最適な巡回路(コスト=64.0)を得ることができた。

次に、図V.4.7.2-1と図V.4.7.2-2に、パラメータA,Bを固定した場合と更新した場合の、制約条件満足度 Π の値の温度変化をそれぞれ示す。



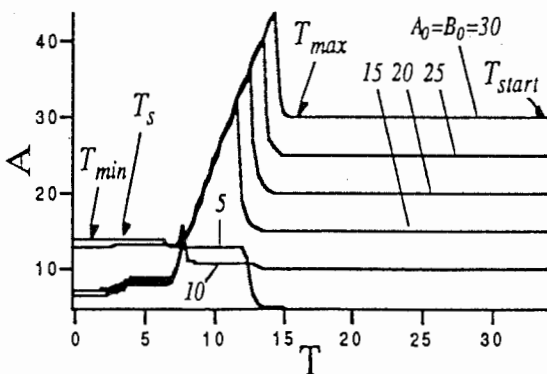
図V.4.7.2-1 パラメータA,Bを固定した場合の制約条件満足度 Π の温度変化(各温度ステップでの最終状態の値。破線は目標曲線 $\Pi_0(T)$).



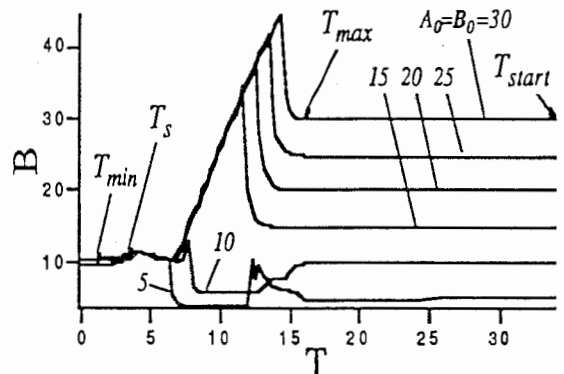
図V.4.7.2-2 パラメータA,Bを更新した場合の制約条件満足度 Π の温度変化(各温度ステップでの最終状態の値。破線は目標曲線 $\Pi_0(T)$).

図V.4.7.2-1と図V.4.7.2-2から、たとえ初期値 $A_0=B_0$ が異なっても、実際に観測される制約条件満足度は、目標と定めた曲線 $\Pi_0(T)$ (図V.4.7.2-1と図V.4.7.2-2中には、破線で示されている)に近づいて行く傾向を見せている。

パラメータA,Bの値が更新されていく様子を図V.4.7.2-3と図V.4.7.2-4にそれぞれ示す。ただし、初期値 $A_0=B_0$ の6通りの場合について、各温度ステップで得られたA,Bの最終的な値のみを表示している。



図V.4.7.2-3 パラメータを更新させた場合の、パラメータAの値の温度変化。



図V.4.7.2-4 パラメータを更新させた場合の、パラメータBの値の温度変化。

図V.4.7.2-2では、制約条件満足度 Π の値が、ある温度を境に、0から急激に立ち上がり、目標曲線 Π_0 に近づいている。これに対応して、 $A_0=B_0 \geq 15$ の場合には、パラメータAとBの値が、 $A_0=B_0=5,10$ の場合には、パラメータBの値が大きくなっている。また、 $A_0=B_0 \geq 15$ では、低温($T < 12.0$ 程度)で Π の値を Π_0 に近づけるために、AとBの値を小さくしているのがわかる。したがって、制約条件満足度 Π がその温度での目標値 $\Pi_0(T)$ に近づいたのは、V.4.4で提案した更新ルールが機能して、パラメータA,Bの値を適切に調節したためであることがわかる。

なお、1つの問題を解くのに要した計算時間(CPUtime)は、(i)の場合で、30~40分程度、(ii)の場合で、30~50時間程度であった。

V.4.8 考察

表V.4.7.2-1にも示したように、アニーリングの最終温度($T_{g3}=0.001$)では、ニューロンは0または1に2値化されるが、実行可能解は得られなかった。Nonakaら [Nonaka92]によると、すべての実行可能解がエネルギー関数($T=0$ で自由エネルギー-Fに一致)の極小状態であるための十分条件は、 $A=B$ の場合、 $A=B \geq \max[d_{ij} s_{ik} (s_{j,k+1} + s_{j,k-1})] \sim 2 \cdot \max d_{ij} = 33.9$ となる。しかし、図V.4.7.2-3と図V.4.7.2-4からわかるように、最終温度で得られたA,Bの値は、これよりもかなり小さい。A,Bの値を十分大きくとれば、アニーリングの最終状態として実行可能解を得る可能性は高くなるが、表V.4.7.2-1-(i)からわかるように、たとえ、アニーリングの途中で巡回路検出処理を施したとしても、最適な巡回路が検出されとは限らない。本手法のように、制約条件項の重みであるA,Bの値を必要最小限だけ強めていくことが、最適解の発見には有効であると考えられる。

また、Hopfieldら[Hopfield85]のようなアナログニューロンを用いて組合わせの最適化問題を解く際には、アナログ状態しか得られないときにどのような2値化を行なうかが問題となる。今回用いた巡回路検出処理は、そうした2値化方法の一種であるが、対象としている問題に応じて工夫しなければならない。この点も、エネルギー関数中のパラメータ値の設定とともに、アナログニューロン系で組合わせ最適化問題を解く際のキーポイントの一つとなるであろう。

計算時間(CN-2で30~50時間程度)についても、パラメータ更新のために、(V.4.4-12)に示した繰り返し計算を行なう必要があり、今後、何らかの近似を用いて、高速化を図る必要がある。決定論的なモデルでは、ゆらぎの効果が平均場近似により部分的にしか考慮されていないので、エネルギー関数のローカル・ミニマムにトラップされてしまう場合が多い。もっと複雑な都市配置を持った巡回セールスマン問題においては、エネルギー値の接近したローカル・ミニマムが多数存在すると考えられるので、ニューロンの初期値状態を変えて、多数回実行する必要がある。この点からも、本アルゴリズムは高速化を図ることが重要である。

巡回セールスマン問題に関しては、IV.4.1でも述べたように、分枝カット法という優れた方法がORの分野で最近提案されており、都市数が2000~3000の問題の厳密解が得られたという報告もされている[Ibaraki92]。弾性ネットを用いる方法も大規模な巡回セールスマン問題には有効な近似解法である[Durbin89]。また、解の表現に訪問順序を表した1次元リストを用いて冗長性をなくし、シミュレテッド・アニーリングにより最適解を求める方法も強力である[Kirkpatrick83]。このように、巡回セールスマン問題には特有の有力な解法がすでに存在している。本アルゴリズムでは解の表現に2次元行列を用いている点が冗長であり、巡回セールスマン問題に適した表現を用いているとは言えない。しかし、エネルギー関数を複数項の線形和で書き下すことは、一般の組合わせ最適化問題の解法としては汎用性があり、本アルゴリズムは巡回セールスマン問題以外の組合わせ最適化問題に広く適用することができる。

V.5 その他の応用への検討

V.5.1 両眼立体視における奥行き知覚の計算論的モデルへの応用

V.5.1.1 研究の背景

人間の奥行き知覚のアルゴリズムを解明することは、非常に難しい問題であり、現在でも定説がないのが現状である。しかしながら、3次元立体テレビのように、人間にとって自然な立体感を与えてくれる3D画像を人工的に作成することが工学の分野で必要となっており、人間の奥行き知覚のアルゴリズムの解明はきわめて重要な研究課題となってきた。

一般に、対象物を3次元的に知覚できる人間の立体感は、視覚器官から直接的に立体感を得る”生理的要因”と、2次元の網膜像から記憶や経験にもとづく判断によって3次元感覚を得る”心理・記憶的要因”の、2種類に大別される。現在、実用的に用いられている3D画像は、前者の”生理的要因”のうちの、両眼水平視差と運動視差（動画の場合）の情報を主として構成されており、自然視の状態と比較して、必要な情報が制限された、かなり特殊な環境を人間に提供しているにすぎないと言える。実際、疲れやすい、奥行き感が不自然である（かき割り効果）等の問題点も指摘されている。

これらの問題点のうち、“かき割り効果”は奥行き知覚量が水平視差のみで与えられる場合に起こり、物体が平面的に知覚されてしまう現象である。これは、水平視差により与えられる奥行き量が画像によって異なる事を示す例である。

Bulthoff-Fahleは、人間の奥行き知覚が視差勾配によって変化する現象を発見した[Bulthoff89]が、この現象は、かき割り効果と同様な現象であり、密接な関係があると考えられる。Yuille-Geiger-Bulthoffらは、この現象の原因を、視差変化の滑らかさに帰着させている[Yuille91]。

もし、人間の奥行き知覚特性を説明できるモデルやアルゴリズムを構築することができれば、かき割り効果を引き起こすメカニズムの解明のみならず、より一般的な人間の奥行き知覚メカニズムの解明に大きく貢献すると考えられる。工学的にも、人工的に作成された 3D 画像の評価技術として、また、自然に見える 3D 画像の作成のための指針をあたえるモデルとして大いに有用であると期待できる。

V.5.1.2 Bulthoff-Fahle の奥行き知覚に関する心理物理実験

Bulthoff-Fahle は、心理物理実験により、奥行きの異なる 2 つの物体の両眼画像を提示すると、視差勾配(図 V.5.1.2-1 の G)が大きくなるにつれて、奥行きの差が実際の値よりも大幅に減少して知覚される場合があるという現象を見いだした [Bulthoff89]。さらに、この減少効果の強さは、対象物体の種類と位置関係に依存していることを定量的に示した。

図 V.5.1.2-1 に Bulthoff-Fahle の実験の内容を示す。被験者に、左右の眼に視差を持たせた 2 つの画像(左眼画像、右眼画像)をそれぞれ提示する。各画像には、2 つの同種類の記号が描かれている。一つは horopter 面(注視点を含む視差が 0 の面)よりも手前にあり、他方は horopter 面よりも向こう側に見えるように視差を考慮して描かれている。記号として、large symbol(大きさ 24min), point(大きさ 2.3min), small symbol(大きさ 5min), line(幅 2.3min) の 4 種類の記号を用意し、この記号が見える奥行きを被験者に答えさせた。

図 V.5.1.2-2 に彼らの実験結果を示す。横軸は、同時に見せた 2 つの記号の視差勾配(図 V.5.1.2-1 の G, 奥行きの傾き)であり、縦軸は実際に被験者により知覚された 2 つの記号の奥行きの差の値(真の値を 100%としている)である。この結果から、

- (i) 被験者は実際よりも奥行きがないように知覚している。

- (ii) 2つの記号の奥行き勾配が大きくなればなるほど、この減少量は大きい。
- (iii) 提示された画像の性質によって、この減少量が異なっている。

ということがわかる。

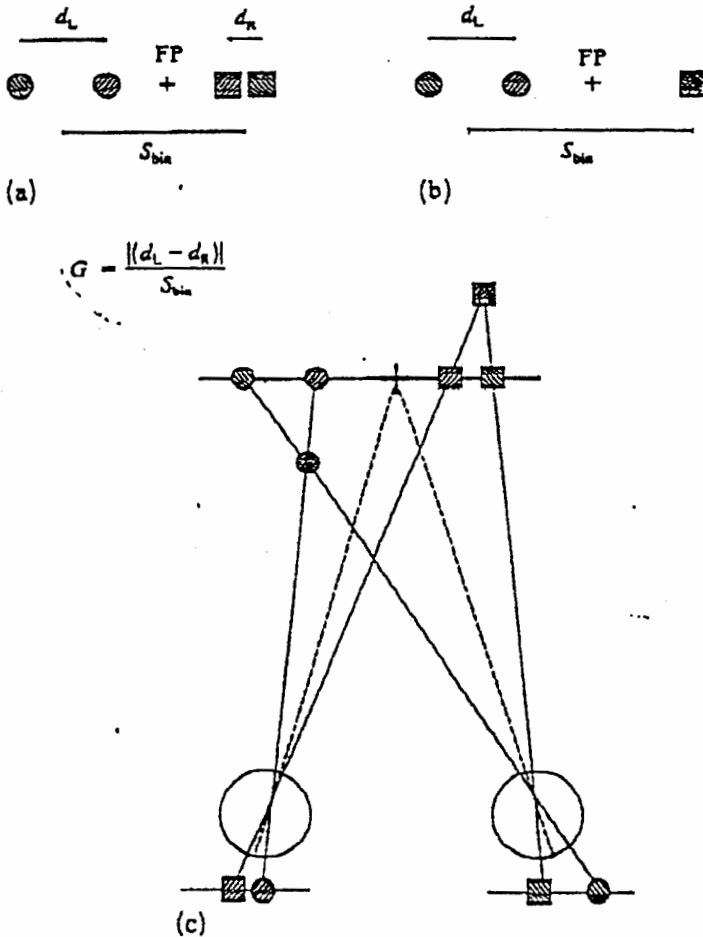


Figure 1. A circle is presented to the left of the fixation point (FP) and in front of the horopter. Projections to the two eyes are symbolized by circles with different orientations of hatching, (////) for the left eye, (\\\\\\\\) for the right eye. To the right of the fixation point, a square is presented behind the horopter. It appears on the left retina (////) at a smaller distance from the fixation point than on the right retina (\\\\\\\\). The arrows give the size of the disparity between the projections to both eyes (d_L , d_R), and the size of the mean binocular distance between the two symbols (S_{bin}) [d_L = disparity of the left stimulus (circle), d_R = disparity of the right stimulus (square), S_{bin} = binocular separation between stimuli]. The disparity gradient G can be defined by the ratio of the absolute disparity difference $|d_L - d_R|$ and the binocular separation S_{bin} (see Burt and Julesz 1980). (a) If one stimulus lies in front of the horopter while the other one is behind the horopter, the arrows point in opposite directions; if both symbols are on the same side of the horopter, the arrows point in the same direction. In (b), the right object is located on the horopter plane and its disparity is therefore zero. The disparity gradient only depends upon the disparity d_L of the left object, and upon the binocular separation S_{bin} . A bird's eye view of the stimulus configuration of (a) is shown in (c).

図V.5.1.2-1 Bulthoff-Fahleの両眼視差による奥行き知覚に関する心理物理実験[Bulthoff89]。

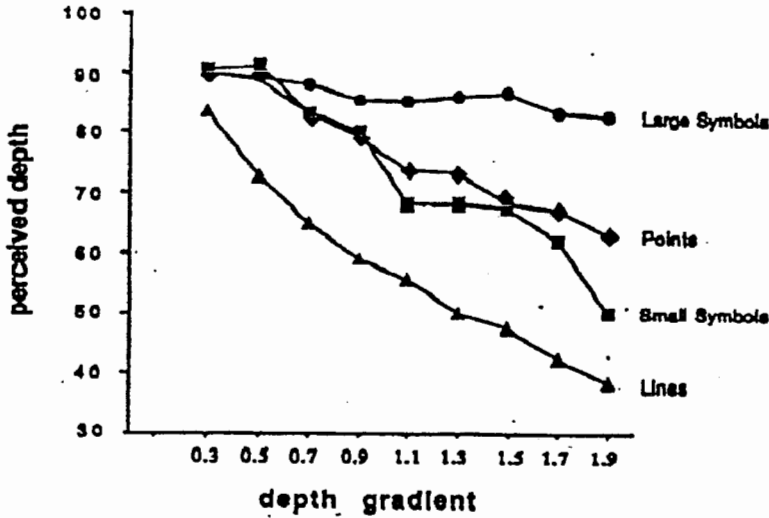


Figure 6: Perceived depth in percent of displayed depth as a function of depth gradient for horizontally oriented stimuli consisting of points, lines and small or large symbols. Means of ten subjects and nine different disparities (3-27 arc min): The standard error of the means is in the order of the symbol size.

図V.5.1.2-2 Bulthoff-Fahle の心理物理実験の結果[Bulthoff89]。横軸は、同時に見せた2つの記号の視差勾配(図V.5.1.2-1のG, 奥行き傾き)であり、縦軸は実際に被験者により知覚された2つの記号の奥行き差の値(真の値を100%としている)である。

V.5.1.3 Yuille-Geiger-Bulthoff による計算論的モデル

Yuille-Geiger-Bulthoff [Yuille91]は、計算論的な立場からこの視覚現象を説明することを試みており、定性的には一応の説明を与えている。まず、両眼の画像の epipolar線同士の対応は取れていると仮定して、1次元の問題に帰着させる。視差 $d(x)$ とマッチング $V_{a,i}$ の2つの場を考え、次のエネルギー関数を考える。

$$E(d(x), V_{a,i}) \equiv \sum_i \sum_a V_{a,i} [d(x_a) - (x_a - y_i)]^2 + \beta \left[\sum_a \left(\sum_i V_{a,i} - 1 \right)^2 + \sum_i \left(\sum_a V_{a,i} - 1 \right)^2 \right] + \gamma \int \left\{ \frac{\partial d(x)}{\partial x} \right\}^2 dx \quad (V.5.1.3-1)$$

$V_{a,i}$ は、左眼画像のa番目の matching primitive (位置 x_a) と右眼画像のi番目の matching primitive (位置 y_i) との対応状態を示す"matching field"であり、0または1の

値を取る。 $d(x)$ は、各点での視差の大きさを表わす"disparity field"である[Yuille91]。(V.5.1.3-1)の第1項は、推定された視差の値と観測値とのフィッティングを表す項であり、 $V_{i,j}$ はそのときのprimitiveの対応状況を表している。第2項は、左眼画像と右眼画像におけるprimitive同士の対応が1対1であることを要請している項である。第3項は、disparity field $d(x)$ の滑らか拘束条件を表しており、1階微分(膜のポテンシャル)を用いている。

このエネルギー関数を最小化することを考えると、2つの物体の視差の差 (i.e. 奥行き差) Δd と視差勾配 G との次のような関係が得られる。

$$\Delta d \approx \Delta d_{true} - 2\gamma \cdot G \quad (V.5.1.3-2)$$

この式は、知覚された Δd の値が、視差勾配 G が大きくなるにつれて、真の値 Δd_{true} から直線的に減少していく現象(図V.5.1.2-2、V.5.1.2の実験結果(i),(ii))をうまく説明している。

さらに、直線の傾きが、対象物体の種類(図V.5.1.2-2では、large symbol, point, small symbol, lineの4種)に依存することについては、次のような説明を与えている。

”特徴量がdotやlineのように、より区別できにくくなれば、あいまいさのない対応を与えるためには、より大きなスムーズネスがエネルギー関数の中で必要となる (i.e. γ の値が大きくなる) ので、(V.5.1.3-2)式から減少の効果が大きくなる。”

[Yuille91]

しかしながら、彼らは、あたえられた両眼画像に対して、具体的な γ の値の設定法を与える事にはまだ成功していない。次節では、この γ の値の設定方法として、われわれは2層確率場モデルを用いることを提案する。

V.5.1.4 平均場近似と2層確率場モデルの適用

エネルギー関数を次のように定義する。

$$E(d(x), V_{ai}) \equiv \sum_i \sum_a V_{a,i} [d(x_a) - (x_a - y_i)]^2 + \alpha \sum_i \sum_a V_{a,i} (f_a - g_i)^2 + \beta \left[\sum_a \left(\sum_i V_{a,i} - 1 \right)^2 + \sum_i \left(\sum_a V_{a,i} - 1 \right)^2 \right] + \gamma \int \left\{ \frac{\partial d(x)}{\partial x} \right\}^2 dx \quad (\text{V.5.1.4-1})$$

(V.5.1.3-1)に比べて、第2項が新たに加わっている。 f_a と g_i は、それぞれ、左眼画像中の a 番目のprimitiveの画素値と、右眼画像中の i 番目のprimitiveの画素値とを表しており、0から(L-1)までの整数とする。(V.5.1.4-1)の第2項は、マッチングの妥当性を、画素値で評価している。これ以外にも、disparity fieldの妥当性を画素値で評価する項として、 $[L(x) - R(x + d(x))]^2$ という項を考慮しても良い[Yuille91]。ただし、 $L(x)$, $R(x)$ は左眼画像と右眼画像をそれぞれ表している。その場合でも、以下に示す方法で全く同じように取り扱うことができる。

ここで、左眼画像と右眼画像において離散座標系を考え、 $\{x_a\}$ や $\{y_i\}$ を含むある有限の1次元領域 D_d 上で $d(x)$ を定義すると、(V.5.1.4-1)は、

$$E(\{d_k\}, \{V_{ai}\}) \equiv \sum_i \sum_a V_{a,i} [d_{x_a} - (x_a - y_i)]^2 + \alpha \sum_i \sum_a V_{a,i} (f_a - g_i)^2 + \beta \left[\sum_a \left(\sum_i V_{a,i} - 1 \right)^2 + \sum_i \left(\sum_a V_{a,i} - 1 \right)^2 \right] + \frac{\gamma}{2} \sum_{k \in D_d} [(d_{k+1} - d_k)^2 + (d_{k-1} - d_k)^2] \quad (\text{V.5.1.4-2})$$

と書ける。

次に、V.1.6で述べた平均場近似を用いて、平均場アニーリング法により(V.5.1.4-2)の最小値を求める。まず、(V.5.1.4-2)のエネルギー関数 E の表現として、次の2通りの表現を考える。

$$E(\{d_k\}, \{V_{ai}\}) = E_V(\{V_{ai}\}, \{d_k\}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{a,i} \sum_{a',i'} W_{ai,a'i'}^V V_{a,i} V_{a',i'} + \sum_{a,i} h_{a,i}^V V_{a,i} + h_0^V \quad (\text{V.5.1.4-3})$$

$$= E_d(\{d_k\}; \{V_{ai}\}) \equiv \frac{1}{2} \sum_{k \in D_d} \sum_{k' \in D_d} W_{k,k}^d d_k d_{k'} + \sum_{k \in D_d} h_k^d d_k + h_0^d \quad (\text{V.5.1.4-4})$$

ただし、(V.5.1.4-3), (V.5.1.4-4)中の各係数は、以下のように定義されている。

$$\left\{ \begin{array}{l} W_{ai,a'i'}^V \equiv \beta(\delta_{a,a'} + \delta_{i,i'}) \\ h_{a,i}^V \equiv \{d_{x_a} - (x_a - y_i)\}^2 + \alpha(f_a - g_i)^2 - 2\beta \\ h_0^V \equiv \frac{\gamma}{2} \sum_{k \in D_d} [(d_{k+1} - d_k)^2 + (d_{k-1} - d_k)^2] + \beta L \end{array} \right. \quad (\text{V.5.1.4-5})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} W_{k,k'}^d \equiv 2 \sum_{a,i} V_{a,i} \delta_{k,k'} \delta_{k,x_a} + 4\gamma \delta_{k,k'} - 2\gamma \delta_{k',k+1} - 2\gamma \delta_{k',k-1} \\ h_k^d \equiv -2 \sum_{a,i} V_{a,i} (x_a - y_i) \delta_{k,x_a} \\ h_0^d \equiv \sum_{a,i} V_{a,i} [(x_a - y_i)^2 + \alpha(f_a - g_i)^2] + \frac{\beta}{2} \left[\sum_a \left(\sum_i V_{a,i} - 1 \right)^2 + \sum_i \left(\sum_a V_{a,i} - 1 \right)^2 \right] \end{array} \right. \quad (\text{V.5.1.4-6})$$

そこで、(V.5.1.4-3)において、 V_{ai} に関して平均場近似を行なう。すなわち、

$$E_V \approx E_V^{mf} \equiv - \sum_{a,i} h_{eff}^V V_{a,i} + h_0^V \quad (\text{V.5.1.4-7})$$

と近似する。ただし、ニューロン V_{ai} が感ずる有効場 h_{eff}^V は、ニューロンの熱平均値を用いて、

$$h_{eff}^V \equiv - \frac{1}{2} \sum_{a',i'} W_{ai,a'i'}^V \langle V_{a',i'} \rangle - h_{a,i}^V \quad (\text{V.5.1.4-8})$$

と表されている。(V.5.1.4-7)の近似(平均場近似)により、(V.1.6-4)と同様にして、

$$\langle V_{a,i} \rangle = \frac{\sum_{V_{a,i}=0,1} V_{a,i} \exp\left(\frac{h_{\text{eff}}^V V_{a,i}}{T}\right)}{\sum_{V_{a,i}=0,1} \exp\left(\frac{h_{\text{eff}}^V V_{a,i}}{T}\right)} = \frac{1}{1 + \exp\left(-\frac{h_{\text{eff}}^V}{T}\right)} \quad (\text{V.5.1.4-9})$$

という再帰的な方程式を導くことができる。しかしながら、(V.5.1.4-5),(V.5.1.4-8)から有効場 h_{eff}^V はdisparity field $\{d_k\}$ に依存する。そこで、 $\{d_k\}$ の値としては、(V.5.1.4-4)の E_d に対して、最急降下法を用いて得られる値を採用する。ただし、その際、(V.5.1.4-6)中の $\{V_{a,i}\}$ は、熱平均値 $\langle V_{a,i} \rangle$ で置き換えたものを用いる。

すなわち、温度 T における $\{V_{a,i}\}$ の熱平均値 $\langle V_{a,i} \rangle$ と、その状況でエネルギー関数を最小にする $\{d_k\}$ の値を、

$$\langle V_{a,i} \rangle = g_0(u_{a,i}; T, \{d_k\}) \quad (\text{V.5.1.4-10})$$

$$\tau_V \frac{du_{a,i}}{dt} = -u_{a,i} - \frac{1}{2} \sum_{a',i'} W_{ai,a'i'}^V \langle V_{a,i} \rangle - h_{a,i}^V \quad (\text{V.5.1.4-11})$$

$$\frac{dd_k}{dt} = -\frac{\partial E_d(\{\{d_k\}; \langle V_{a,i} \rangle\})}{\partial d_k} = -\sum_{k' \in D_d} W_{k,k'}^d d_{k'} - h_k^d \quad (\text{V.5.1.4-12})$$

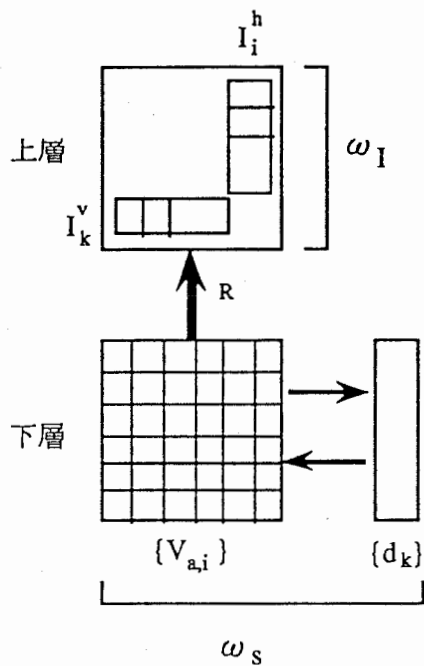
から、繰り返し計算により求める。ただし、 $g_0(u; T)$ はsigmoid関数、

$$g_0(u; T) \equiv \frac{1}{1 + e^{-u/T}}$$

であり、 $u_{a,i}$ は $u_{a,i} = h_{\text{eff}}^V$ で定義され、ニューロン $V_{a,i}$ の内部状態と見なすことができる。

次に、2層確率場モデルの考えを用いて、(V.5.1.4-2)のエネルギー関数中の重みパラメータ (α, β, γ) の調節方法を検討する。2層確率場モデルの下層 ω_s として、matching field $\{V_{a,i}\}$ とdisparity field $\{d_k\}$ とが、(V.5.1.4-2)のエネルギー関数を通して結合した体系を考える。すなわち、 $\omega_s = (\{V_{a,i}\}, \{d_k\})$ ただし、上で述べた平均場近似により、温度 T における $\{V_{a,i}\}$ の熱平均値 $\langle V_{a,i} \rangle$ と、その状況でエネルギー関数を最小にする $\{d_k\}$ の値は、(V.5.1.4-10)-(V.5.1.4-12)により計算されるものとする。

2層確率場モデルの上層 ω_I として、matching field $\{V_{a,i}\}$ が制約条件(各行各列で 1 になるニューロンはただ一つで、残りはすべて 0 になる)を満足する度合いを、0 から 1 の実数値で表した関数、 $\{I_i^h\}, \{I_k^v\}$ ($i=1, \dots, N, k=1, \dots, N, N$; primitive の個数)の値を要素とするニューロン層を考える。このときの下層から上層への写像 R としては、例えば、巡回セールスマン問題のときに用いた、(V.3.3-1),(V.3.3-2)を採用すればよい。この様子を図V.5.1.4-1に示す。



図V.5.1.4-1 2層確率場モデルによりモデル化された Matching field $\{V_{a,i}\}$ と Disparity field $\{d_k\}$.

以下は、V.4.4で述べた議論がそのまま成り立ち、パラメータ α 、 β 、 γ の更新ルールを導くことができる。

V.5.2 多目的最適化問題への応用 - 配送問題 -

V.5.2.1 研究の背景

V.3とV.4では、2層確率場モデルの組み合わせ最適化問題への応用として、巡回セールスマン問題を取り上げた。しかし、巡回セールスマン問題は、実社会における組み合わせ最適化問題としては、構造が単純化されすぎている。実社会における問題は、様々な制約条件が複雑にからんでくるであろう。本章(V.5.2)では、実用的な組み合わせ最適化問題として、車両(トラック)により荷物を効率良く配送する問題(“配送問題”)を取り上げる。

本章(V.5.2)で取り扱う配送問題が、巡回セールスマン問題と大きく異なるのは、同一道路上であっても上りと下りというように向きによって走行速度が異なる場合があることや、車両の到着時刻の指定、停車時間の制限(“軒先条件”)、積載量に関する制限などの様々な制約条件があること、最短経路を求めることと同時に配送先の複数車両への割当の問題をも解かなければならない点である。さらに、何を目的関数とするかは、場合によって異なることがあり、簡単に切り替えられるのが望ましい。また、複数の目的を達成することが要求される場合(多目的最適化問題)もある。

一般に、配送問題、広くは“物流問題”(物流効率を向上させる問題)は、直接的には、企業における物流コストの削減が目的である。しかし、社会的視点から見た場合、高齢化社会における労働力不足の問題、省エネルギー問題、地球環境問題、交通問題、物価問題などとも間接的ながら関連が深い。また、物流効率の問題は、一企業内の問題にとどまらず、共同輸配送システムのような多企業間の問題にも発展すると予想される。さらには、日本国内のみならず、世界的な規模でのニーズが期待され、実用上の意義は極めて大きいと考えられる。次節では、このような配送問題への2層確率場モデルの応用を検討する。

V.5.2.2 配送問題

本節では、取り扱う配送問題の内容について具体的に説明する。

【配送問題】

配達すべき荷物とその配送先が与えられている。これらの荷物を複数の車両(車両数は固定)に割り当てて配達させる。制約条件を満足する解(feasible solution, 実行可能解)のうちで、目的関数を最小にする解(optimal solution, 最適解)を求めたい。

【制約条件】

- (I) 配送先での到着指定時刻の範囲(上限と下限)が設定されている。
- (II) 配送先での停車時間の範囲(上限と下限)が設定されている。
- (III) 出発地点と最終帰着地点は地図上に指定されている。
- (IV) 出発時刻は指定されている。
- (V) 各道路における車両の走行速度は、道路ごとに与えられている。ただし、方向(上りと下り)によっても異なるとする。
- (VI) 各車両には、積載量に関して上限がある。

【目的】

- (a) 各車両が配達に要した時間の合計を最小にする。
- (b) すべての配送を完了する時刻を最も早くする。

目的(a)は、配送コスト(運賃+人件費)に比例する量である。また、目的(b)は、生鮮食料品などのように販売時刻が問題とされる場合である。目的として(a)と(b)の両方が要求される場合もある(多目的最適化問題)。

上で定義した” 配送問題” は、次の 2 つのサブ問題に分割して考えることができる。

【サブ問題】

(A) 各車両の積載量(制約条件 VI)を考慮して、配送先を各車両に割り当てる問題。

(B) 各車両ごとに、制約条件 I~V を考慮して、割り当てられた配送先を最小時間で訪問する経路(スケジュール)を求める問題。

サブ問題 A は、配送先を複数の車両(車両数は固定)に割り当てる問題である。本来は、制約条件 VI(各車両の積載量の上限)だけではなく、他の制約条件 I~V や目的関数の値をも考慮しなければならないが、近似的に割当結果を評価できれば、上記のように 2 つのサブ問題に分割することも可能である。サブ問題 A は、一種のクラスターリングの問題とみなすこともできる。

サブ問題 B は、与えられた複数の配送先を 1 台の車両により最少時間で訪問する問題で、いわば巡回セールスマン問題の応用編である。

配送問題は、各車両のスケジュール(各時刻にどの場所にいるかということ)を決める問題であるので、各車両のスケジュールを状態空間に選んで、エネルギー関数を定義して simulated annealing などの手法を施せば、原理的には最適解が見つかるはずである。しかし、この状態空間は、非実行可能解を多く含み非常に冗長であり、実際の計算には向いていない。

そこで、まず、配送先を各車両に割り当てて、サブ問題 B を解いて各車両のスケジュールを求め、この配送先の割当を全体の目的関数(a または b)により評価する。この目的関数が最小となる割当を simulated annealing により求める(サブ問題 A)。ただし、この方法が適用できるためには、サブ問題 B を高速に解く必要がある。

次に、以下のような記号を定義する。

【記号】

- 配送先のすべての可能な割当を Λ であらわす。1つの割当の状態を $\Lambda_\lambda (\lambda = 1, \dots, |\Lambda|)$ で表す。
- 車両を $\alpha (\alpha = 1, \dots, M)$ で表し、ある割当 Λ_λ の下での車両 α の配送順序を $\{c_i^\lambda(\alpha)\} (i=1, \dots, N^\lambda(\alpha), N^\lambda(\alpha); \text{配送先の軒数})$ で表す。ただし、出発地点を $c_0^\lambda(\alpha)$ 、帰着地点を $c_N^\lambda(\alpha)$ で表す。また、車両 α の配送先の集合を $\Omega^\lambda(\alpha)$ と記す。
- 配送先 $c_i^\lambda(\alpha)$ での到着時刻を $x_i^\lambda(\alpha)$ 、出発時刻を $y_i^\lambda(\alpha)$ で表す。
- 配送先 c での停車時間の下限、上限を $t_1^*(c), t_2^*(c)$ と置く。
- 配送先 c での到着指定時刻の下限、上限を $t_1^*(c), t_2^*(c)$ と置く。
- 車両 α の所要時間(出発地点を出て、帰着地点に着くまでの時間)を $D^\lambda(\alpha)$ と記す。
- 配送先Aから配送先Bへ移動するのに必要な所要時間を $f(A, B)$ で表す。各配送先間の所要時間は、あらかじめ(ダイクストラの方法[Nishikawa82]などにより)計算されており既知であるとする。
- 配送先 c への荷物の量を $R(c)$ 、車両 α の積載量の上限を $W(\alpha)$ とする。

以上の準備の下で、サブ問題Aとサブ問題Bの解法を考える。

【サブ問題Aの解法】

配送先の総数を N とする。長さが N の1次元リストを考える。リスト中の位置と配送先の地点が1対1に対応しているとする。リストの各要素は、離散値ニューロンであり、1から M までの値を取る。したがって、この1次元リストの状態が、各車両への配送先の割当を表している。次のエネルギー関数 E_A を定

義し、simulated annealingによりエネルギー最小状態を求める。エネルギー関数として、

目的aの場合には、

$$E_A(\Lambda_\lambda) \equiv \sum_{\alpha=1}^M D^\lambda(\alpha) + \gamma \sum_{\alpha=1}^M g \left(\sum_{i \in \Omega^\lambda(\alpha)} R(c_i^\lambda(\alpha)); W(\alpha) \right) \quad (\text{V.5.2.2-1})$$

目的bの場合には、

$$E_A(\Lambda_\lambda) \equiv \max_{\alpha} D^\lambda(\alpha) + \gamma \sum_{\alpha=1}^M g \left(\sum_{i \in \Omega^\lambda(\alpha)} R(c_i^\lambda(\alpha)); W(\alpha) \right) \quad (\text{V.5.2.2-2})$$

を考える。第1項の $D^\lambda(\alpha)$ は、車両 α の所要時間であり、サブ問題Bの最適解である。第2項は、各車両の積載量の上限に関する制限(制約条件VI)の違反量を表している。関数 $g(X;W)$ は、例えば、 $X < W$ ならば $g(X;W)=0$ 、 $X \geq W$ ならば $g(X;W)=X-W$ である関数などが考えられる。

ここで、2層確率場モデルにより、重み係数 γ を適切な値に調節しながら、最適解を求める方法が考えられる。

【サブ問題Bの解法】

与えられた配送先 Λ_λ を配送順に並べた1次元リストLを考える。Lを元に、線形計画法により、制約条件I~Vの下で所要時間 E_B が最短となるの経路を求める。すなわち、各車両(α)の各配送先への到着時刻 x_i^λ と出発時刻 y_i^λ を決定変数として、

$$\text{目的関数: } E_B \equiv \sum_{i=1}^{N^\lambda(\alpha)} (y_i^\lambda - x_i^\lambda) + \sum_{i=0}^{N^\lambda(\alpha)} f(c_i^\lambda(\alpha), c_{i+1}^\lambda(\alpha)) \rightarrow \text{最小.}$$

$$\text{制約条件: } \forall i \in \{1, \dots, N^\lambda(\alpha)\}, \quad t_1^a(c_i^\lambda(\alpha)) \leq x_i^\lambda \leq t_2^a(c_i^\lambda(\alpha))$$

$$\forall i(\in \{1, \dots, N^\lambda(\alpha)\}), \quad t_1^s(c_i^\lambda(\alpha)) \leq y_i^\lambda - x_i^\lambda \leq t_2^s(c_i^\lambda(\alpha))$$

$$\forall i(\in \{1, \dots, N^\lambda(\alpha)\}), \quad 0 \leq x_i^\lambda \leq y_i^\lambda$$

$$\forall i(\in \{1, \dots, N^\lambda(\alpha) - 1\}), \quad x_{i+1}^\lambda - y_i^\lambda \geq f(c_i^\lambda(\alpha), c_{i+1}^\lambda(\alpha))$$

という線形計画問題を解くことに帰着する。この問題の最適解の E_B の値を、サブ問題Aにおける $D^\lambda(\alpha)$ の値とする。なお、線形計画問題については、古くから種々の高速解法が提案されている[Ibaraki91][Ibaraki93]。

上の、配送問題の例では、サブ問題Aを解く過程において、2層確率場モデルを用いるといった応用が可能である。サブ問題Aで定義されたエネルギー関数 E_A では、各車両の積載量の上限に関する制約項だけを考えているが、この他にも、積載容積に関する制約条件や、同一車両に積載できない品物の組み合わせ(例えば、食品と薬品など)などの制約条件を制約項として考慮しなければならない場合もある。このように、エネルギー関数中の制約項が複数個存在し、その重み係数も独立に考える場合には、重み係数の調整に2層確率場モデルの利用がいつそう有効であろうと考えられる。

第VI章 まとめ

VI.1 本論文のまとめ

第I章では、現在までの、ニューロコンピューティングの研究について簡単なまとめを記した。そこでは、ニューラルネットワークの工学的な応用を、目的あるいは機能別に(i)例示による近似関数の作成、(ii)識別空間の作成、(iii)エネルギー最小化による問題解決、の3つに大別した。これらの中で、本論文では(iii)の分野を取り扱った。

第II章では、組合わせ最適化問題の解法として提案されたKirkpatrickらによるシミュレーテッド・アニーリングを用いた方法やボルツマンマシンなどの確率的な動作を行なうモデルによる解法、その平均場近似にあたり決定論的に動作するHopfieldらのモデルの仕組みについて簡単にまとめた。

次に、第III章では、このうちのHopfieldらのモデルをベースにしたモデルをパターンマッチング(ラベリング)の問題に応用した。ここでは、従来からパターンマッチングの有力な方法として提案されてきたRosenfeldの緩和ラベリング法と、Hopfieldらのモデルが、近似的に等価であることを示し、従来は経験的に行なっていた適合係数の計算を学習により行なうことが可能なニューロモデル(ニューラル緩和ラベリング法)を提案し、それを2次元の線画マッチングの問題に適用して有効性を示した。

この例でも示されているように、一般に組合わせ最適化問題をエネルギー最小化問題に帰着させて解く際には、エネルギー関数中に重み係数などの未定の係数を含んでしまうのが普通である。しかし、これらの係数をどのような値に設定すれば良いかということは簡単ではない場合が多い。さらに、エネルギー関数が非線形演算子を含んだり、1次関数や2次関数でないような複雑な場合には、Lagrangeの未定乗数法や最急降下法では大局的なエネルギー最小状態を求めるのは

難しい。

組合わせの最適化問題以外にも、一般の逆問題(既知の写像 $R:S \rightarrow I$ の下で、 I を与えて S を求める問題)はニューロン系のエネルギー最小化問題に帰着させることができる。そこで、エネルギー関数が非線形で、かつ、重み係数などの未知パラメータを含む場合に、未知パラメータを適切な値に調節しながらエネルギー最小状態を求めるという”2層確率場モデル”による方法を第IV章で提案した。この方法は、元来は視覚情報処理やコンピュータビジョンにおける逆問題の解法として考案されたが、一般の逆問題の解法として広い汎用性を持っている。

従来、視覚情報処理における逆問題のニューロコンピューティングによるアプローチとして、標準正則化理論、結合MRFモデル、川人-乾の視覚情報処理モデルなどがエネルギー最小化の枠組みの中で提案されてきた。2層確率場モデルを用いた方法では、エネルギー関数中に非線形演算子を含むのが許され、順方向の写像(R)の導関数や逆関数を用いる必要がなく、未知パラメータの値も適切に自動調節できるという点で、これらのモデルにない長所を持っている。この2層確率場モデルの一般論を第IV章で詳述した。

また、組合わせ最適化問題も、制約条件を与えてそれを満足する状態を求めるという一種の逆問題と見なすこともできるので、この2層確率場モデルを用いて重み係数などのエネルギー関数中の未知パラメータを適切な値に調整しながら、エネルギー最小状態を求めることにより、解くことができる。

第V章では、2層確率場モデルの検証と実際の問題への応用をかねて、画像処理の分野では、エッジ情報を用いた画像修復の問題と、コーナーなどの特徴点の情報を用いたエッジ修復の問題を取り上げ、組合わせ最適化問題の分野では、巡回セールスマン問題を取り上げた。巡回セールスマン問題では、さらに、2層確率場モデルに平均場近似を施すことも試みた。画像修復の問題と平均場近似を用いた巡回セールスマン問題の解法においては、ニューロンの動作などの処理を並列化することにより、SIMD型の並列計算機であるコネクションマシン(CM-2)を用い

ることが可能となった。これらの応用問題における実験を通して、パラメータ更新ルールの正当性が検証され、逆問題の解法と最適解の探索に2層確率場モデルがきわめて有効であることが実証できた。

さらに、上記以外の問題への応用として、両眼立体視における奥行き知覚の計算モデルとしての可能性と、巡回セールスマン問題よりはるかに複雑である配送問題への応用を検討した。前者の問題では、脳における視覚情報処理の計算モデルとしての2層確率場モデルの可能性を探り、後者の問題では、2層確率場モデルの実社会におけるインパクトのある応用が可能であるかを検討した。

VI.2 今後の展開

本論文で提案した2層確率場モデルによるパラメータ調整と最適解探索の手法は、エネルギー最小化問題に帰着できる問題すべてに適用できる一般性のある手法である。従って、本論文で示したような画像修復や巡回セールスマン問題のみならず、一般の、コンピュータ・ビジョンの問題や組み合わせ最適化問題に応用することができるかと期待される。

しかしながら、現在のところ、2層確率場モデルによるパラメータ更新には、計算時間がかかりすぎるという欠点がある。何らかの近似を用いて、高速に計算することができれば、一層、応用範囲が広まると期待される。かつ、脳における情報処理モデルとしてもいくらかの可能性が出てくるであろう。

また、将来は、ボルツマンマシンなどのニューロチップも開発されてくると予想される。こうしたニューロチップを用いることも、計算時間を短縮する上で有力な方法と言えよう。これらのことを念頭において、2層確率場モデルに関する研究を今後も進めていく予定である。

本論文で述べた研究の大部分は、下記の論文にまとめられている。

【論文】

- [1] 五十嵐治一:"ニューラルネットワークモデルを用いた緩和ラベリング法の提案", 人工知能学会誌, Vol.6, No.6, pp.65-74(1991).
- [2] 五十嵐治一, 川人光男:"標準正則化理論の2層確率場モデルへの拡張", 電子情報通信学会論文誌D-II, Vol.J75-D-II, No.1, pp.157-161(1992).
- [3] 五十嵐治一:"シミュレーテッドアニーリング法におけるエネルギー関数中のパラメータ値の決定法", 電子情報通信学会論文誌D-II, Vol.J75-D-II, No.7, pp.1232-1240(1992).
- [4] 五十嵐治一, 川人光男:"2層確率場モデルを用いた特徴点からのエッジ修復", 電子情報通信学会論文誌D-II, Vol.J76-D-II, No.9, pp.2066-2074(1993).
- [5] 五十嵐治一:"2層確率場モデルを用いた組合わせ最適化問題の解法 -平均場近似-", 電子情報通信学会論文誌D-II, Vol.J76-D-II, No.9, pp.2093-2101(1993).
- [6] 五十嵐治一, 川人光男:"2層確率場モデルによる逆問題の解法 -エッジ情報を用いた画像修復への応用-", 電子情報通信学会論文誌D-II(投稿中、ただし条件付き採録に決定済み).

【国際学会予稿集】

- H.Igarashi and M.Kawato, " A Proposal for a Hierarchical MRF Model Based on Conditional Probability" ('91.11 IJCNN'91 Singapore, Vol.1, pp.268-274).
- H.Igarashi, " An Estimation of Parameters in an Energy Function Used in a Simulated Annealing Method" ('92.6 IJCNN'92 Baltimore, Vol.4, pp.480-485).
- H.Igarashi, " A Solution to Combinatorial Optimization Problems Using a Two-layer Random Field Model -Mean Field Approximation-" ('93.7 WCNN'93 Portland, Vol.1, pp.283-286).

謝辞

本論文は、筆者が(株)リコー 中央研究所と(株)ATR視聴覚機構研究所(1990.4-1993.3)に在職中に、1988年4月から1993年3月の間に行なった研究の成果をまとめた論文である。

本研究を行なう機会を与えてくださいました、(株)リコー中央研究所、尾上守夫 所長(現 副社長)、(株)ATR視聴覚機構研究所、淀川英司社長(現 工学院大学教授)、同認知機構研究室 中根一成室長(現 NTTヒューマンインターフェース研究所グループリーダー)、下原勝憲室長と、執筆の機会を与えてくださいました、(株)人間情報通信研究所、東倉洋一社長につつしんで感謝の意を表します。

本研究を行なう過程において、多くの方々から適切な助言をいただき、かつ、有益な討論をしていただきました。第II章での平均場アニーリングなどの理論に関しては、(株)ATR人間情報通信研究所、佐藤雅昭主任研究員のご教示によるところが多く、第III章で述べた緩和ラベリング法に関しては、九州工業大学情報工学部、江島俊朗教授と、(株)リコー情報通信研究所、小川泰嗣研究員に適切な助言をいただきました。また、第IV章で提案した、"2層確率場モデル"の構築にあたり、(株)ATR人間情報通信研究所、川人光男第三研究室室長と早川秀樹研究員(現 (株)大阪ガス)には、有益な討論を通して大きな貢献をしていただきました。特に、川人室長には第V章で述べた画像修復とエッジ修復の研究の共同研究者として、適切なアドバイスをいただきました。心から感謝いたします。

また、第V章で両眼立体視における奥行き知覚に関してご討論いただいた、(株)ATR視聴覚機構研究所、魚森謙也研究員(現 松下電器産業(株))、配送問題についてご教示いただいた、(株)コーベック、山本正社長、ならびに、大学院在学中に統計物理学の研究をご指導いただきました、東京大学教養学部、氷上忍教授に感謝いたします。最後に、プログラミングの上で、優秀な能力を大いに発揮して本研究に協力してくれた、(株)CSK、吉川徹氏にお礼申し上げます。

文献

[Abe91]

Abe S.: "Global Convergence and Suppression of Spurious States of the Hopfield Neural Networks", IJCNN'91 SINGAPORE, Vol.2, pp.935-940(1991).

[Ackley85]

Ackley D.H., Hinton G.E. and Sejnowski T.J. : "A Learning Algorithm for Boltzmann Machines", Cognitive Sci., Vol.9, pp.147-169 (1985).

[Aihara88]

合原一幸 : "ニューラルコンピュータ -脳と神経に学ぶ-", 東京電機大学出版局 (1988).

[Akiyama90]

秋山泰 : "ホップフィールド型ニューラルネットにおけるエネルギー最小状態への収束性を向上させる3つの技法", 信学技報 Vol.NC90-40, pp.73-80.

[Amari78]

甘利俊一 : "神経回路網の数理 -脳の情報処理様式-", 産業図書(1978).

[Amari89]

甘利俊一 : "ニューラルネットワーク研究の過去, 現在, 将来", 人工知能学会誌, Vol.4, No.2, pp.120-127(1989).

[Asou88]

麻生英樹 : "ニューラルネットワーク情報処理", 産業図書(1988).

[Bulthoff89]

Bulthoff H., Fahle M.: "Disparity Gradients and Depth Scaling", MIT AI Memo, No.1175(September 1989)

[Burr87]

Burr D.C.: "Implications of the Craik-O'Brien illusion for brightness perception", Vision Research, 27, pp.1903-1913(1987).

[Durbin89]

Durbin R., Szeleski R. and Yuille A.:"An Analysis of the Elastic Net Approach to the Traveling Salesman Problem", *Neural Computation* Vol.1, pp.348-358(1989).

[Ejima85]

江島俊朗, 木村正行 : "弛緩法における修正作用素の検討", *電子情報通信学会論文誌D* Vol.J68-D, pp.2099-2106(1985).

[Ejima88]

江島俊朗 : "Rosenfeld型のRelaxation Operator の理論的解釈", *電子情報通信学会論文誌D* Vol.J71-D, pp.612-613(1988).

[Faugeras81]

Faugeras O.D., Berthod M. : "Improving Consistency and Reducing Ambiguity in Stochastic Labeling", *IEEE Trans. Pattern Anal.Machine Intell.*Vol.PAMI-3, pp. 412-424(1981).

[Feller57]

Feller W. : "An Introduction to Probability Theory and Its Applications", John Wiley & Sons(vol.1, 1957; vol.2, 1966) (河田龍夫, 国沢清典監訳 : "確率論とその応用 (I,II)", 紀伊国屋書店).

[Fiorentini72]

Fiorentini A. : "Mach band phenomena", in D.Jameson and L.M.Hurvich(Eds.), *Handbook of sensory physiology, VII/4, Visual Psychophysics*(pp.188-201) New York:Springer-Verlag(1972).

[Fujisawa89]

藤沢肇, 山根茂, 小田洋一, 小野武年, 西条寿夫 : "脳と情報 : I.脳・神経生物学から", 別冊「数理科学」, サイエンス社, pp.7-50(1989).

[Fukushima86]

福島邦彦 : "視覚パターン認識における選択的注意機構の神経回路モデル", *信学論(D)*, J69-D[6], pp.993 -1003(1986).

[Geman84]

Geman S., Geman D. : "Stochastic Relaxation, Gibbs Distributions, and the Bayesian Restoration of Images", *IEEE Trans. Pattern Anal. & Mach. Intell.*, PAMI-6, pp.721-741 (1984).

[Gidas89]

Gidas B.: "A renormalization group approach to image processing problems", IEEE Trans. Pattern Anal. & Mach. Intell., PAMI-11, pp.164-180 (1989).

[Goldberg89]

Goldberg D.E.: "Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning", Addison-Wesley(1989).

[Hegde88]

Hegde S.U., Sweet J.L., Levy W.B.: "Determination of Parameters in a Hopfield/Tank Computational Network", Proc. IEEE Int. Conf. Neural Netw., Vol.II, pp.291-298 (1988).

[Hayakawa92]

早川秀樹, 川人光男, 乾敏郎: "陰影による形状知覚の階層的計算モデル", 電子情報通信学会論文誌D-II, Vol.J75-D-II, No.11, pp.1940-1947(1992).

[Hongo91]

本郷節之, 乾敏郎, 川人光男, 三宅誠: "エネルギー学習機能をもつ局所並列確率アルゴリズムによる輪郭線抽出", 電子情報通信学会論文誌D-II, J74-D-II, 3, pp. 348-356(1991).

[Hongo92]

本郷節之, 乾敏郎, 川人光男: "明るさ知覚の計算理論と神経回路モデル-充てん過程のマルコフ確率場モデル-", 電子情報通信学会論文誌D-II, Vol.J75-D-II, No.11, pp.1959-1967(1992).

[Hopfield82]

Hopfield J.J.: "Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities", Proc. Natl. Acad. Sci., Vol.79, pp.2554-2558(1982).

[Hopfield84]

Hopfield J.J.: "Neurons with graded response have collective computational properties like those of two-state neurons", Proc. Natl. Acad. Sci., Vol.81, pp.3088-3092(1984).

[Hopfield85]

Hopfield J.J. and Tank D.W.: "Neural Computation of Decisions in Optimization Problems", Biol. Cybern., 52, pp.141-152(1985).

[Horn81]

Horn B.K.P. and Shunck B.G.: "Determining optical flow", *Artif. Intell.*, 17, pp.185-203 (1981).

[Hummel83]

Hummel R.A., Zucker S.W. : "On the Foundation of Relaxation Labeling Process", *IEEE Trans. Pattern Anal. Machine Intell.* Vol.PAMI-5, pp.267-287(1983).

[Ibaraki91]

茨木俊秀, 福島雅夫: "最適化プログラミング", 岩波書店, (1991).

[Ibaraki92]

茨木俊秀: "組合わせ問題とその複雑さ", *人工知能学会研究会資料 SIG-F/H/K/S/I-9202*, pp.19-30(1992).

[Ibaraki93]

茨木俊秀, 福島雅夫: "最適化アルゴリズムの最近の動き", *システム/制御/情報*, Vol.37, No.4, pp.191-199(1993).

[Igarashi91]

五十嵐治一: "ニューラルネットワークモデルを用いた緩和ラベリング法の提案", *人工知能学会誌*, Vol.6, No.6, pp.65-74(1991).

[Igarashi92]

五十嵐治一, 川人光男: "標準正則化理論の2層確率場モデルへの拡張", *電子情報通信学会論文誌D-II*, Vol.J75-D-II, No.1, pp.157-161(1992).

[Igarashi92-2]

五十嵐治一: "シミュレートドアニーリング法におけるエネルギー関数中のパラメータ値の決定法", *電子情報通信学会論文誌D-II*, Vol.J75-D-II, No.7, pp.1232-1240(1992).

[Igarashi93]

五十嵐治一: "2層確率場モデルを用いた組合わせ最適化問題の解法 -平均場近似-", *電子情報通信学会論文誌D-II*, Vol.J76-D-II, No.9, pp.2093-2101(1993).

[Igarashi93-2]

五十嵐治一, 川人光男: "2層確率場モデルを用いた特徴点からのエッジ修復", *電子情報通信学会論文誌D-II*, Vol.J76-D-II, No.9, pp.2066-2074(1993).

[Igarashi94]

五十嵐治一, 川人光男 : "2層確率場モデルによる逆問題の解法 -エッジ情報を用いた画像修復への応用-", 電子情報通信学会論文誌D-II(投稿中).

[Ikeuchi81]

Ikeuchi K. and Horn B.K.P.: "Numerical shape from shading and occluding boundaries", *Artif. Intell.* 17, pp.141-184 (1981).

[Inui89]

乾 敏郎, 三宅誠 : " 図形の構造記述と視覚記憶のモデル(I)", 信学技報 Vol. MBE 89-14, pp.91-98(1989).

[Inui90]

乾 敏郎 : "視覚情報処理の基礎", サイエンス社、第2章 pp.124-126(1990).

[Ito89]

伊藤正男, 塚原仲晃, 川人光男, 原啓明, 平井有三 : "脳と情報：II.学習と記憶のモデル", 別冊「数理科学」, サイエンス社, pp.51-90(1989).

[JAI88]

林 弘, 伊藤健司, 他 : "特集：エキスパートシステム", 人工知能学会誌, Vol.3, No.1, pp.8-52(1988).

[JAI89]

甘利俊一, 麻生英樹, 他 : "特集：ニューラルネットワーク", 人工知能学会誌, Vol.4, No.2, pp.120-164(1989).

[JAI91]

寺野隆雄, 阿瀬始, 他 : "特集：人工知能の理論と実際", 人工知能学会誌, Vol.6, No.6, pp.788-822(1991).

[Julesz71]

Julesz B.: "Foundations of Cyclopean Perception", University of Chicago Press(1971).

[Kamgar-Parsi90]

Kamgar-Parsi B., Kamgar-Parsi B. : "On Problem Solving with Hopfield Neural Networks", *Biol. Cybern.*, Vol.62, pp.415-423(1990).

[Kawato90]

川人光男, 乾敏郎 : "視覚大脳皮質の計算理論", 信学論(D-II), J73-D-II, 8, pp.1111-1121(1990).

[Kawato91]

M.Kawato, T.Inui, S.Hongo and H.Hayakawa: "Computational Theory and Neural Network Models of Interaction Between Visual Cortical Areas", ATR Technical Report, TR-A-0105(1991).

[Kirkpatrick83]

Kirkpatrick S., Gelatt Jr. C.D. , Vecchi M.P. : "Optimization by Simulated Annealing", Science, Vol.220, pp.671-680 (1983).

[Kirkpatrick84]

Kirkpatrick S. : "Optimization by Simulated Annealing: Quantitative Studies", Journal of Statistical Physics, Vol.34, pp.975-986 (1984).

[Koch86]

Koch C., Marroquin J. and Yuille A.:"Analog neuronal networks in early vision", Proc. Natl. Acad.Sci. USA, Vol.83, pp.4263-4267, June 1986, Biophysics.

[Kohonen88]

Kohonen T., Barna G., Chrisley R. : "Statistical pattern recognition with neural networks: Benchmarking studies", IEEE Proc. ICNN, Vol.I, pp.61-68(July 1988).

[Konno78]

今野浩, 山下浩 : "非線形計画法", 日科技連, (1978).

[Lin73]

Lin S., Kernighan B.W. : "An efficient heuristic algorithm for the traveling salesman problem", Operations Research, Vol.21, pp.498-516(1973).

[Marroquin85]

Marroquin J.: "Probabilistic Solution of Inverse Problems"(MIT AI-TR860, 1985).

[Matsuyama89]

松山隆司 : "画像理解における推論方式", 人工知能学会誌, Vol.4, No.1, pp.21-29(1989).

[McDermott91]

McDermott E., Katagiri S. : "LVQ-Based Shift-Tolerant Phoneme Recognition", IEEE Transactions on Signal Processing, Vol.39, No.6, pp.1398-1411(1991).

[MATSC91]

倉田耕治, 西森秀稔, 他 : "特集：ニューラルネットの数理 -脳の解明に向けて-", 数理科学, No.338, pp.5-68(1991.8).

[Nikkei90]

"特集：ニューラルネットワーク・アプリケーション", 日経AI別冊, 1990秋号, pp.17-83(1990).

[Nikkei91]

"特集：日本のエキスパートシステムを総ざらいする", 日経AI別冊, 1991冬号, pp.15-67(1991).

[Nikkei92]

"特集：新たな展開期を迎えるニューラルネットワーク", 日経AI別冊, 1992夏号, pp.15-151(1991).

[Nishikawa82]

西川, 三宮, 茨木 : "最適化", 岩波講座 情報科学19, 岩波書店(1982).

[Nonaka92]

Nonaka H. and Kobayashi Y. : "Sub-optimal Solution Screening in Optimization by Neural Networks", IJCNN'92BALTIMORE, Vol.IV, pp.606- 611(1992).

[Ogawa87]

小川, 森下 : "ファジーモデル緩和法による線画マッチング", 情報処理学会第35回全国大会4K-8(1987).

[Oguchi70]

小口武彦 : "磁性体の統計理論", 裳華房, 第2章pp.33-37(1970).

[Okabe88]

岡部洋一 : "神経回路モデル向き計算機からニューロコンピュータへの道", Computer Today, No.27, pp.4-7(1988.9).

[Oohori91]

大堀、山根、佐々木:"2値モデルニューラルネットによる巡回セールスマン問題の一解法", 信学論(D-II), J74-D-II, 12, pp.1788-1793 (1991-12).

[Oohori92]

大堀、中村、渡辺:"アルゴリズム駆動型アナログニューラルネットによるTSPの解法", 信学論(D-II), J75-D-II, 12, pp.2072-2074 (1992-12).

[Peterson87]

Peterson C. and Anderson J.R.:"A Mean Field Theory Learning Algorithm for Neural Networks", Complex Systems, 1, pp.995-1019(1987).

[Peterson89]

Peterson C. and Soderberg B.:"A New Method for Mapping Optimization Problems onto Neural Networks", International Journal of Neural Systems, 1, pp.3-22(1989).

[Pineda87]

Pineda F.J.:"Generalization of Back-Propagation to Recurrent Neural Networks", Phys.Rev.Lett., 59, pp. 2229-2232(1987).

[Poggio85]

Poggio T., Torre V., and Koch C.:"Computational vision and regularization theory ", Nature, 317, pp.314-319(1985).

[Poggio85-2]

Poggio T., Voorhees H. and Yuille A.:"A regularized solution to edge detection", AI Lab. Memo, No.833(MIT, Cambridge, 1985).

[Rosenfeld76]

Rosenfeld A., Hummel R.A., Zucker S.W. : "Scene Labeling by Relaxation Operations", IEEE Trans.Syst.Man.Cybern., Vol.SMC-6, pp.420-433(1976).

[Rumelhart86]

Rumelhart D.E., McClelland J.L. and The PDP Research Group : "Parallel Distributed Processing", vol.1, MIT Press(1986).

[Sato90]

Sato M. : "A Learning Algorithm to Teach Spatiotemporal Patterns to Recurrent Neural Networks", Biol. Cybern. Vol.62, pp.259-263(1990).

[Sato90-2]

佐藤 雅昭 : "ベクトルライン過程によるエッジの回転不変なエネルギー関数",
信学技報 Vol.NC89- 53, pp.29 -32(1990).

[Science88]

岡部洋一, 臼井支朗, 他 : "特集 : ニューロコンピュータ -第 6 世代コンピュータ
への道 -", Computer Today, No.27, (1988.9)

[Sugie73]

杉江昇 : "視覚研究ノートI - 静止網膜像における F 過程 - ", 電総研彙報, 37,
272-282(1973).

[Takagi91]

高木幹雄, 下田陽久(監修) : "画像解析ハンドブック", 東京大学出版会,
pp.383-422(1991).

[Takeda86]

Takeda M., Goodman J.W. : "Neural Networks for Computation: Number
Representations and Programming Complexity", Appl. Opt., Vol.25, pp.3033-3046
(1986).

[Tanaka84]

田中幸吉(編) : "知識工学", 浅倉書店(1984).

[Terzopoulous86]

Terzopoulous D.:"Regularization of Inverse Problems Involving Discontinuities", IEEE
Trans. Pattern Anal. & Mach. Intell., PAMI-8, pp.413-424(1986).

[Uesaka90]

上坂吉則, 尾関和彦 : "パターン認識と学習のアルゴリズム", 文一総合出版(1990).

[Ullman84]

Ullman S.:"Maximizing rigidity: the incremental recovery of 3-D structure from rigid and
rubbery motion", Perception, Vol.13, pp.255-274(1984).

[Van den Bout89]

Van den Bout D.E., Miller III T.K. : "Improving the Performance of the Hopfield-Tank
Neural Network Through Normalization and Annealing", Biol. Cybern., Vol.62,
pp.129-139 (1989).

[Wahba90]

Wahba G. : "Spline Models for Observational Data", Society for Industrial and Applied Mathematics(1990).

[Wilson88]

Wilson G.V., Pawley G.S. : "On the Stability of the Travelling Salesman Problem Algorithm of Hopfield and Tank", Biol. Cybern., Vol.58, pp.63-70 (1988).

[Yamamoto82]

山本和彦 : "弛緩整合法による手書き教育漢字認識", 電子情報通信学会論文誌 D, Vol.J65-D, pp.1167-1174(1982).

[Yuille91]

Yuille A.L., Geiger D. and Bulthoff H.H.: "Stereo integration, mean field theory and psychophysics", Network, 2, pp.423-442(1991).

[Zucker81]

Zucker S.W., Leclerc Y.G., Mohammed J.L.: "Continuous Relaxation and Local Maxima Selection", IEEE Trans. Pattern Anal.Machine Intell.Vol.PAMI-3, pp.117-127(1981).

付録A. シミュレーテッド・アニーリング法の原理

ここでは、シミュレーテッド・アニーリング法の原理について述べる[Uesaka90]。まず、最小にしたい関数Eを目的関数(ニューロン系でのエネルギー関数)と呼ぶ。体系(システム)の状態をx、体系の取りうるすべての状態の集合をSで表す。Eの最小値 F_{\min} を与えるxの集合を S_0 とする。このとき、

【定義】

$$q_0(x) \equiv \begin{cases} 1/|S_0| & \text{if } x \in S_0 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (\text{A-1})$$

で与えられる確率分布 q_0 を目的関数Eの最適分布と呼ぶ。ただし、 $|S_0|$ は、集合 S_0 の要素の個数を表している。

次に、S上の確率分布としてGibbs分布を、目的関数Eと体系の温度Tを用いて、

【定義】

$$q_T(x) \equiv \frac{e^{-E(x)/T}}{\sum_{x \in S} e^{-E(x)/T}} \quad (\text{A-2})$$

で定義する。Gibbs分布 q_T と最適分布 q_0 の間には、次の定理が成り立つ。

【定理A-1】

$$\lim_{T \rightarrow 0} q_T = q_0 \quad (\text{A-3})$$

従って、体系がGibbs分布に従うように体系の状態を更新すればよい。

そのために次の遷移確率で生成されるマルコフ連鎖 $(X(0), X(1), X(2), \dots, X(t))$ は時刻tにおける体系の状態を表す確率変数)を考える。

【定義】

$$P(X(t+1) = y | X(t) = x) = G_T(x, y) \quad (\text{A-4})$$

ただし、右辺の $G_T(x, y)$ は、Gibbs行列と呼ばれ、摂動行列 P と受理行列 A_T とを用いて次のように定義される。

【定義】

$$G_T(x, y) \equiv \begin{cases} P(x, y)A_T(x, y) & \text{if } x \neq y \\ 1 - \sum_{y(\neq x)} P(x, y)A_T(x, y) & \text{if } x = y \end{cases} \quad (\text{A-5})$$

摂動行列 P は、試行変形 $x \rightarrow y$ に対応し、次の性質を満たすものであれば良い。

【定義】

$$\begin{aligned} \forall x, y \in S: & \quad P(x, y) \geq 0 \\ \forall x \in S: & \quad P(x, x) = 0 \\ \forall x \in S: & \quad \sum_{y \in S} P(x, y) = 1 \\ \forall x, y \in S: & \quad P(x, y) = P(y, x) \\ \forall x, y \in S, \exists s: & \quad P^s(x, y) > 0 \end{aligned} \quad (\text{A-6})$$

受理行列 A_T は、メトロポリス法においては、次のように定義される。

【定義】

$$A_T(x, y) \equiv \min\{1, e^{-(E(y)-E(x))/T}\} \quad (\text{A-7})$$

(A-5)-(A-7)から、Gibbs分布 q_T とGibbs行列 G_T の間には、次の詳細釣り合い条件 (detailed balance condition) が成立する。

【詳細釣り合い条件】

$$\forall x, y \in S: \quad q_T(x)G_T(x, y) = q_T(y)G_T(y, x) \quad (\text{A-8})$$

さらに、この詳細釣り合い条件が成立していれば、次の定理が成り立つ。

【定理A-2】

$$\forall T: q_T G_T = q_T \quad (\text{A.9})$$

この定理は、Gibbs行列 G_T で定まるマルコフ連鎖(A-4)の平衡状態における確率分布はGibbs分布 q_T であることを表している。従って、(A-6)の性質を持つ試行変形を行ない、(A-7)の確率でその状態を受理していけば、Gibbs分布に従う熱平衡状態に到達することが保証される。

さらに、Gibbs行列 G_T は、次の既約性と非周期性を持っている。

【Gibbs行列の既約性】

$$\forall x, y \in S, \exists n: G_T^n(x, y) > 0 \quad (\text{A-10})$$

【Gibbs行列の非周期性】

$$\forall x \in S: G.C.M \text{ of } \{m | G_T^m(x, x) > 0\} \text{ is } 1. \quad (\text{A-11})$$

従って、Gibbs行列 G_T を推移確率行列とするマルコフ連鎖(A-4)は既約で非周期性なマルコフ連鎖であることがわかる。既約で非周期性なマルコフ連鎖に対しては、次のマルコフ連鎖のエルゴード定理が成立することが知られている[Feller57]。

【マルコフ連鎖のエルゴード定理】

既約で非周期性なマルコフ連鎖には、唯一の平衡分布が存在し、初期分布によらずに、状態の確率分布はその平衡分布に収束する。

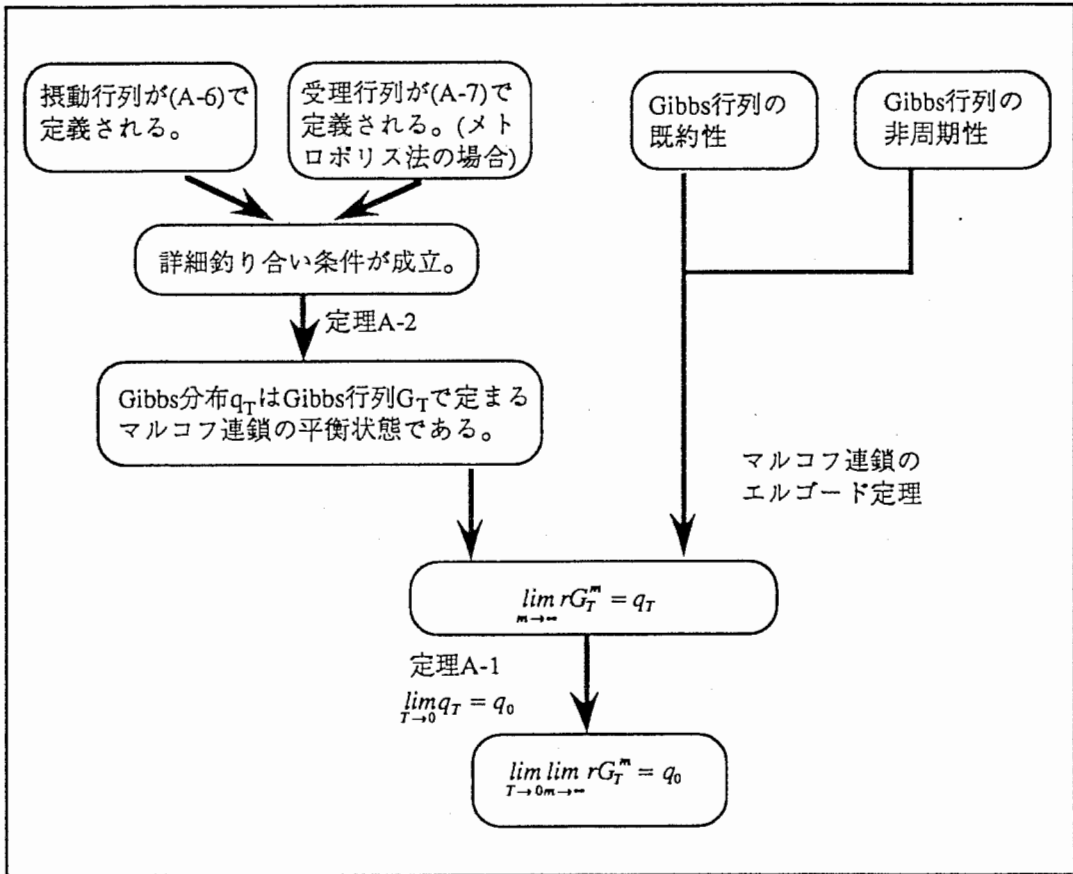
定理A-2からGibbs行列 G_T で定まるマルコフ連鎖の平衡分布はGibbs分布であることが言えるので、このエルゴード定理を用いると、任意の初期確率分布 r に対して、

$$\lim_{m \rightarrow \infty} rG_T^m = q_T \tag{A-12}$$

が成り立つ。この式を定理A-1の(A-3)の左辺に代入すると、

$$\lim_{T \rightarrow 0} \lim_{m \rightarrow \infty} rG_T^m = q_0 \tag{A-13}$$

が成立する。すなわち、Gibbs行列 G_T で定まるマルコフ連鎖に沿って状態を更新(具体的には、(A-6)の性質を持つ試行変形を行ない、(A-7)の確率でその状態を受理していくことを繰り返す)すれば、十分低い温度 T に対して、体系の状態確率分布を最適分布 q_0 に近づけることができ、従って、目的関数(エネルギー関数) E の最小状態を発見する確率が十分高くなることがわかる。これが、シミュレーテッド・アニーリング法の原理である。以上のロジックの流れを図A-1に示す。



図A-1 シミュレーテッド・アニーリング法の原理

付録B. 特徴量の詳細

III.2.1の(III.2.1-8),(III.2.1-9)で用いられている特徴量 $\epsilon_{0M}(i,l)$ ($M=1,2$) と $\epsilon_{1N}(i,j,l,s)$ ($N=1,\dots,6$) の定義と意味を以下に示す。

ϵ_{0N} : 線分の不一致度を表す特徴量 (-1 ~ +1) :

■ $\epsilon_{01}(i,l)$: 2つの線分 x_i と x_l の傾きの相違度。

$$\epsilon_{01}(i,l) \equiv 1 - 2(x_i \cdot x_l / \|x_i\| \|x_l\|)^2 \quad (B-1)$$

ただし、 $\|x\|$ はベクトル x のノルムを表す。

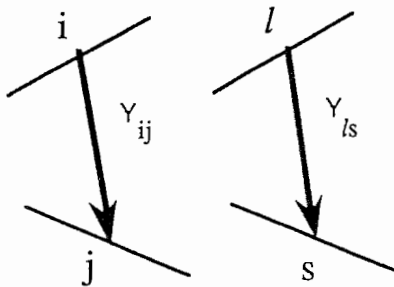
■ $\epsilon_{02}(i,l;\beta_{02})$: 差ベクトルの長さによる2つの線分 x_i と x_l の相違度。

$$\epsilon_{02}(i,l;\beta_{02}) \equiv 1 - 2/(1 + \|x_i - x_l\|/\beta_{02}) \quad (B-2)$$

ϵ_{1N} : 線分間の関係の不一致度を表す特徴量 (-1 ~ +1)

■ $\epsilon_{11}(i,j,l,s)$: 線分 i の中点と線分 j の中点とを結ぶベクトル y_{ij} と、線分 l の中点と線分 s の中点とを結ぶベクトル y_{ls} とがなす角度。

$$\epsilon_{11}(i,j,l,s) \equiv -y_{ij} \cdot y_{ls} / \|y_{ij}\| \|y_{ls}\| \quad (B-3)$$



■ $\epsilon_{12}(i,j,l,s;\beta_{12})$: 上で述べたベクトル y_{ij} と y_{ls} の差ベクトルの長さ。

$$\epsilon_{12}(i,j,l,s;\beta_{12}) \equiv 1 - 2/(1 + \|y_{ij} - y_{ls}\|/\beta_{12}) \quad (B-4)$$

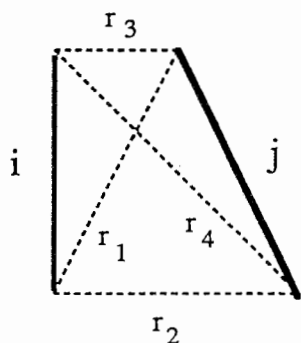
- $\epsilon_{13}(i,j,l,s)$: 線分*i*と線分*j*とのなす角度 ϕ_{ij} と、線分*l*と線分*s*とのなす角度 ϕ_{ls} との不一致度。

$$\epsilon_{13}(i,j,l,s) \equiv -\cos(2|\phi_{ij} - \phi_{ls}|) \quad (B-5)$$

$$\left[\begin{array}{l} \phi_{ij} \equiv \min(\theta_{ij}, \pi - \theta_{ij}), \quad \phi_{ls} \equiv \min(\theta_{ls}, \pi - \theta_{ls}) \\ \theta_{ij} \equiv \cos^{-1}(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{x}_j / \|\mathbf{x}_i\| \|\mathbf{x}_j\|), \quad \theta_{ls} \equiv \cos^{-1}(\mathbf{x}_l \cdot \mathbf{x}_s / \|\mathbf{x}_l\| \|\mathbf{x}_s\|) \end{array} \right]$$

- $\epsilon_{14}(i,j,l,s; \beta_{14})$: 2つの線分の端点間の距離(r_1, r_2, r_3, r_4)の最小値*r*の不一致度。*r*がある値 R_{14} 以下の場合にのみ考慮する。互いの端点が接続している場合に特に有効である。文献[Yamamoto82]で用いられた特徴量に相当する。

$$\epsilon_{14}(i,j,l,s; \beta_{14}) \equiv \begin{cases} 1 - 2/(1 + |r_{ij} - r_{ls}|/\beta_{14}) \\ \text{if } r_{ij} \leq R_{14} \text{ or } r_{ls} \leq R_{14} \\ 0 \text{ otherwise} \end{cases} \quad (B-6)$$



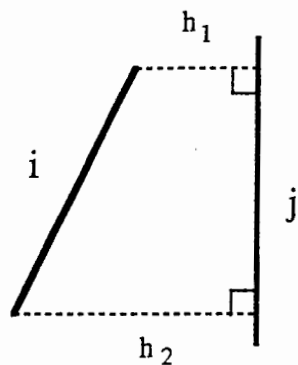
- $\epsilon_{15}(i,j,l,s; \beta_{15})$: 線分*i*の端点から他方の線分*j*に下した垂線の短い方の長さ H_{ij} と、線分*l*と*s*との H_{ls} との不一致度。 ϵ_{14} と同じく近距離でのみ考慮する。添字の置換に不変ではなく、一般に

$$\epsilon_{15}(i,j,l,s; \beta_{15}) \neq \epsilon_{15}(j,i,l,s; \beta_{15})$$

$$\epsilon_{15}(i,j,l,s; \beta_{15}) \neq \epsilon_{15}(j,i,s,l; \beta_{15})$$

である。 $\epsilon_{14}(i,j,l,s; \beta_{14})$ と同様に近距離でのみ考慮する。この特徴量は、十字交差とT字交差との区別に有効であると考えられる。

$$\varepsilon_{15}(i, j, \ell, s; \beta_{15}) \equiv \begin{cases} 1 - 2 / (1 + |H_{ij} - H_{\ell s}| / \beta_{15}) \\ \text{if } H_{ij} \leq R_{15} \text{ or } H_{\ell s} \leq R_{15} \\ 0 \text{ otherwise} \end{cases} \quad (\text{B-7})$$



■ $\varepsilon_{16}(i, j, \ell, s; \beta_{16})$: 2つの線分の長さの差の不一致度。線分の長短関係が重要な場合に有効である。

$$\varepsilon_{16}(i, j, \ell, s; \beta_{16}) \equiv 1 - 2 / (1 + |L_{ij} - L_{\ell s}| / \beta_{16}) \quad (\text{B-8})$$

$$\begin{cases} L_{ij} \equiv \|x_i\| - \|x_j\| \\ L_{\ell s} \equiv \|x_\ell\| - \|x_s\| \end{cases}$$

なお、 ε_{01} 、 ε_{02} 、 ε_{11} 、 ε_{12} は小川ら [Ogawa87] の用いた特徴量と同一であり、また、 β_{02} 、 β_{12} 、 β_{14} 、 β_{15} 、 β_{16} 、 R_{14} 、 R_{15} は定数で、今回の実験ではこれらの値はすべて50に設定した。

付録C. パラメータ更新ルールの並列処理化

(V.1.2-1)で表されたエネルギー関数中のパラメータ $\{a_{ij}^v\}, \{a_{ij}^h\}$ と $\{b_{ij}\}$ の値の更新ルールの並列処理化について述べる。以下では、(V.1.3-1)の導出についてのみ述べているが、(V.1.3-2)についても全く同様な方法で導くことができる。

図V.1.3-1のように、パラメータ a_k に隣接する画素値を f_k^1, f_k^2 とする。このとき、平均場近似的に、

$$P(\{f_{ij}\}) \approx P(f_k^1, f_k^2)P(\overline{\{f_{ij}\}}) \quad (C-1)$$

とし、閾値処理 R_h がローカルな操作であるとする、

$$P(\omega'_0|\{f_{ij}\}) \approx P(l'_k|\{f_k^1, f_k^2\})P(\overline{\omega'_0}|\overline{\{f_{ij}\}}) \quad (C-2)$$

と近似できる。ただし、 $\overline{\{f_{ij}\}}$ は、 $\{f_{ij}\}$ から f_k^1 と f_k^2 の画素を除いた強度過程上の状態

変数の集合を表わす。また、 l'_k は、理想的なエッジの状態 ω'_0 の位置 k での値を、

$\overline{\omega'_0}$ は、 ω'_0 から l'_k を除いた線過程上での望ましい状態を表わしている。

さらに、 $\frac{\partial E}{\partial a_k}$ も f_k^1, f_k^2 だけから計算できるので、(C-1), (C-2)を用いると、

$$\begin{aligned} & \sum_{\{f_{ij}\}} P(\{f_{ij}\}) \cdot P(\omega'_0|\{f_{ij}\}) \frac{\partial E}{\partial a_k} \\ & \approx \sum_{\{f_{ij}\}} P(f_1, f_2) P(\overline{\{f_{ij}\}}) \cdot P(l'_k|\{f_1, f_2\}) P(\overline{\omega'_0}|\overline{\{f_{ij}\}}) \frac{\partial E}{\partial a_k} \end{aligned} \quad (C-3)$$

$$= \sum_{\{f_1, f_2\}} P(f_1, f_2) \cdot P(l'_k|\{f_1, f_2\}) \frac{\partial E}{\partial a_k} \cdot \sum_{\overline{\{f_{ij}\}}} P(\overline{\omega'_0}|\overline{\{f_{ij}\}}) P(\overline{\{f_{ij}\}}) \quad (C-4)$$

となる。同様にして、

$$\Pi(\omega'_0) \approx \sum_{\{f_1, f_2\}} P(f_1, f_2) \cdot P(l'_k | \{f_1, f_2\}) \cdot \sum_{\{f_{ij}\}} P(\{f_{ij}\}) \cdot P(\omega'_0 | \{f_{ij}\}) \quad (\text{C-5})$$

と近似できる。(C-4),(C-5)を(IV.3.1-5)へ代入すると、 a_k の更新則がローカルな変数 f_k^1, f_k^2, l'_k だけから(V.1.3-1)のように表わされる。ただし、(IV.3.1-5)の $\Pi_0(\omega')$ は、 $\omega' = \omega'_0$ で1、それ以外の ω' では0となるものを用いる。

付録D. パラメータ更新則における時間幅

V.3.7で述べたように、パラメータ $\{\theta_r\}$ の更新則(IV.4.3-9)の左辺の時間幅 Δt_i ($i=1, \dots, N_{\text{update}}$)は一定ではなく、以下のように計算により求めた[Igarashi92-2]。

まず、温度一定の下では、

$$\Delta \Pi \approx \sum_r \frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r} \cdot \Delta \theta_r \quad (\text{D-1})$$

が成り立つ。右辺の $\Delta \theta_r$ に、(IV.4.3-7)を代入すると、

$$\Delta \Pi \approx -\left\{ \Pi(\omega_j^0; \{\theta_r\}, T) - \Pi_0(T) \right\} \sum_r \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r} \right)^2 \cdot \Delta t \quad (\text{D-2})$$

となる。今、 i 回目の更新のときに、1回の更新につき望ましい Π の変化量を、

$$\Delta \Pi = \left\{ \Pi_0(T) - \Pi(\omega_j^0; \{\theta_r\}, T) \right\} / (N_{\text{update}} - i + 1) \quad (\text{D-3})$$

とすると、(D-2)と(D-3)とから、 i 回目の時間幅

$$\Delta t_i = 1 / \left[(N_{\text{update}} - i + 1) \sum_r \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \theta_r} \right)^2 \right] \quad (\text{D-4})$$

を得る。ただし、 $\Delta t_i \leq \Delta t_{\text{max}}$ と上限を設け、V.3.7の実験では $\Delta t_{\text{max}}=500.0$ と設定した。