

TR-H-065

0045

一般回帰による正則化理論の多価関数への拡張と
線過程を用いない不連続関数再構成アルゴリズム

水谷 博之

1994. 3. 16

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

一般回帰による正則化理論の多価関数への拡張と
線過程を用いない不連続関数再構成アルゴリズム

水谷 博之

ATR 人間情報通信研究所

あらまし

標準正則化理論あるいはその拡張理論において重要な役割を演ずる滑らかさの尺度を一切必要としない一般回帰による正則化理論を取り上げ、データが多価の場合にも正則化が行えるように理論の拡張を行う。また、この拡張された理論を基に、不連続を異なる関数の境界として捉えることで従来の線過程を必要としない不連続関数を離散データから決定論的に再構成するアルゴリズムを導く。さらに計算機実験を行いこのアルゴリズムの有効性とノイズに対するロバスト性を示す。

キーワード

正則化、一般回帰、不連続

Abstract

We extend a regularization theory which is based on general regression in order to apply it to multi-valued regularization. This regularization theory do not require any smoothness measures which play an important role in standard regularization theory. We also propose a new discontinuous function reconstruction algorithm from discrete data without conventional line processes. This algorithm is very simple and leads deterministically to a unique solution. We show it's usefulness and robustness against noise by several computer simulations.

Keywords

regularization, general regression, discontinuity

もくじ

あらまし	1
キーワード	1
1 まえがき	3
2 標準正則化理論	4
3 一般回帰による正則化理論	4
4 多価関数に対する理論の拡張	6
4.1 一般論	6
4.2 2 価関数に対する正則化解	7
5 線過程を用いない不連続関数再構成アルゴリズム	9
5.1 多重度判定アルゴリズム	9
5.2 関数選択アルゴリズム	10
6 不連続関数再構成実験	10
7 結び	11
謝辞	13
参考文献	14
図、表	16

1 まえがき

Poggio らによってコンピュータビジョンの世界に導入された標準正則化は正則化しようとする連続関数の滑らかさ（連続性）を予め仮定することにより不良設定問題を良設定問題に変換する理論である [1]。

この正則化では、従来から 2 次の連続性をもつ membrane モデルあるいは 4 次の連続性をもつ thin plate モデルが関数の滑らかさを表わすために用いられてきた [2][3][4]。また、Terzopoulos は奥行き不連続と方向不連続を持った曲面をスパースデータから再構成するために、“spline under tension” と呼ばれる 2 次および 4 次の連続性を局所的にコントロールする正則化手法を提案した [5]。

いずれの場合も物理モデルに基づいた滑らかさの尺度を用いて正則化を行うものであるが、正則化の対象とモデルが一致しない場合には、正則化は行われても物理的には不適切な解が得られることになるから、モデルの選択は重要な問題である。しかし、多くの場合モデル選択に関する議論は行われず、モデルは先験的に与えられてきた。

一方、画像復元や面再構成問題で与えられたデータから不連続関数を再構成する際には、線過程を導入し不連続を直接扱うメカニズムが用いられてきた [6][7][8]。これは正則化を行うための評価関数において、線過程を表わす評価関数と連続関数に対する評価関数が相互作用するように定式化されている。このため線過程を導入した正則化は、一般的には非線形最適化問題となり、局所的最適解は比較的容易に得られるものの、大域的最適解を得るには simulated annealing で代表されるような膨大な計算を必要とする手法によらなければならなかった。

以上の問題を解決するために、一般回帰 (general regression) による正則化 [9] に着目した。これは与えられたデータの密度分布、あるいは確率的に解釈すればデータが与えられる確率分布さえ分かれば正則化を行うことができるので、標準正則化のように関数の連続性を限定する必要が一切なく、従って滑らかさの尺度に関する物理的モデルを導入する必要がない。またデータ密度分布が知られていない一般的な場合でも、与えられたデータからそれを推定することにより容易に正則化が行える利点がある。さらに得られる正則化解の形は非常に簡単であり、密度分布のモーメントのみで表わされる。

本論文ではこの一般回帰による正則化理論を、これまでの一価関数に対する理論から多価関数に対する理論への拡張を行った。この拡張では志沢が標準正則化理論を多価関数へ拡張した際に導いた多価データに対する拘束条件 [13] を用いた。さらに、拡張理論を基に、不連続を異なる関数の境界として捉えることで従来の線過程

を必要としない不連続関数を離散データから再構成するアルゴリズムを導いた。

次節では標準正則化と一般回帰による正則化との関係を明確にするために標準正則化理論に関する簡単な説明を行う。第3節では一般回帰による正則化理論について述べ、第4節で多価関数に対する拡張理論を導く。第5節では不連続関数再構成アルゴリズムを導出し、第6節では不連続関数再構成に関する計算機実験を行う。

2 標準正則化理論

n 次元空間上におけるスカラー値データに対する標準正則化理論は次のエネルギー汎関数の最小化問題として定義される。

$$J_1[f] = \sum_{i=1}^N (y_i - f(\vec{x}_i))^2 + \lambda \|Qf(\vec{x})\|^2 \quad (1)$$

ここで y_i は位置 \vec{x}_i で得られた観測データであり、 λ, Q はそれぞれ正則化パラメータ、線形作用素である。この作用素としては関数 $f(\vec{x})$ の連続性（滑らかさ）を規定するものがもっぱら用いられてきた。例えば2次元 thin plate モデルの場合は次式で定義される。

$$\|Qf(\vec{x})\|^2 = \int \int f_{x_1 x_1}^2 + 2f_{x_1 x_2}^2 + f_{x_2 x_2}^2 dx_1 dx_2 \quad (2)$$

ただし、 $f_{x_i x_j} = \partial^2 f(\vec{x}) / \partial x_i \partial x_j$ である。 $Q^* Q K(\vec{x}, \vec{\xi}) = \delta(\vec{x} - \vec{\xi})$ を満足するグリーン関数 $K(\vec{x}, \vec{\xi})$ を用いると、 $J_1[f]$ を停留にする f は次式で求まる [10]。

$$f(\vec{x}, \lambda) = \sum_{i=1}^N c_i K(\vec{x}, \vec{x}_i) \quad (3)$$

ただし、 c_i は次の線形連立方程式の解である。

$$(K + \lambda I)\vec{c} = \vec{y} \quad (4)$$

ここで、 $(K)_{ij} = K(\vec{x}_i, \vec{x}_j)$ 、 I は単位行列、 $\vec{c} = (c_1, \dots, c_N)^t$ 、 $\vec{y} = (y_1, \dots, y_N)^t$ 。

3 一般回帰による正則化理論

一般回帰による正則化理論は次のエネルギー汎関数の最小化問題として定義される。

$$\begin{aligned} J_2[f] &= \|y - f(\vec{x})\|_p^2 \\ &= \int \int \rho(\vec{x}, y) (y - f(\vec{x}))^2 d\vec{x} dy \end{aligned} \quad (5)$$

ここで、 $\rho(\vec{x}, y)$ は観測データ $\{\vec{x}_i, y_i\}_{i=1..N}$ の密度分布である。式 (5) は \vec{x}, y を確率変数、 $\rho(\vec{x}, y)$ を \vec{x} と y の同時確率密度関数と見なせば、 y と確率関数 $f(\vec{x})$ の平均 2 乗誤差とみなせる。すなわちこの場合、正則化によって得られる解は y と確率関数 $f(\vec{x})$ の平均 2 乗誤差を最小にする。

さて、 $J_2[f]$ の変分を実行すると式 (5) を停留にする f は、

$$f(\vec{x}) = \frac{\int y \rho(\vec{x}, y) dy}{\int \rho(\vec{x}, y) dy} \quad (6)$$

と求められる。この式より解 $f(\vec{x})$ は $\rho(\vec{x}, y)$ を与えたときの y の回帰曲面を表わしていることがわかる。

ところで事前に ρ が知られていることは稀であり、実際には観測データ $\{\vec{x}_i, y_i\}_{i=1..N}$ から ρ を推定する必要がある。 ρ としては式 (6) の右辺が存在するものであれば一般には不連続関数を含むどんな関数を用いても構わない。今、次式のように ρ が独立変数 \vec{x} と y に関して変数分離される場合を考えよう。

$$\rho(\vec{x}, y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \rho_1(\vec{x}, \vec{x}_i) \rho_2(y, y_i) \quad (7)$$

この時、

$$A(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{\rho_1(\vec{x}, \vec{x}_i)}{\sum_{j=1}^N \rho_1(\vec{x}, \vec{x}_j) \int \rho_2(y, y_j) dy} \quad (8)$$

$$\phi(y_i) = \int y \rho_2(y, y_i) dy \quad (9)$$

とおくと、式 (6) は標準正則化による正則化解 (3) と対比される表現に書き換えられる。

$$f(\vec{x}) = \sum_{i=1}^N \phi(y_i) A(\vec{x}, \vec{x}_i) \quad (10)$$

具体的な ρ_1, ρ_2 として次式のように観測データ $\{\vec{x}_i, y_i\}_{i=1..N}$ を中心としたガウス分布を仮定する。

$$\begin{aligned} \rho_1(\vec{x}, \vec{x}_i) &= G(\vec{x} - \vec{x}_i, \sigma_{1,i}) \\ \rho_2(y, y_i) &= G(y - y_i, \sigma_{2,i}) \end{aligned} \quad (11)$$

ただし、 $G(x, \sigma)$ は平均 0、分散 σ^2 のガウス関数。この時 ρ は

$$\rho(\vec{x}, y) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N G(\vec{x} - \vec{x}_i, \sigma_{1,i}) G(y - y_i, \sigma_{2,i}) \quad (12)$$

また、式 (10) における A と ϕ は次のようになる。

$$A(\vec{x}, \vec{x}_i) = \frac{G(\vec{x} - \vec{x}_i, \sigma_{1,i})}{\sum_{j=1}^N G(\vec{x} - \vec{x}_j, \sigma_{1,j})} \quad (13)$$

$$\phi(y_i) = y_i \quad (14)$$

ここでスケールパラメータ σ の選び方について言及しよう。式(12)において $\sigma_{1i} = \sigma_{2i} = \sigma$ のとき、Parzen[11] および Cacoullos[12] はデータ数 N と σ が次式で表される条件を満足するとき、推定された ρ は真の密度分布に漸近することを示した。

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sigma(N) = 0 \quad (15)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} N\sigma^n(N) = \infty \quad (16)$$

ここで、 n は空間次元。この条件を満足する σ の例は、平均サンプリング幅を Δx と書くと $\sigma = (\Delta x)^{1/2}$ である。

さて、一般回帰による正則化と標準正則化との対応を見るために式(12)でスケールパラメータ $\sigma_{1i} = \sigma_{2i} = \sigma$ の極限を考える。よく知られているように分散が σ^2 である n 次元ガウス関数は $\sigma \rightarrow 0$ の極限ではデルタ関数と見なされる。すなわち、

$$\lim_{\sigma \rightarrow 0} G(\vec{x}, \sigma) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{e^{-\vec{x}^2/2\sigma^2}}{(\sigma\sqrt{2\pi})^n} = \delta(\vec{x}) \quad (17)$$

この関係と式(12)で定義された ρ を用いると $J_2[f]$ は

$$J_2[f] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - f(\vec{x}_i))^2 \quad (18)$$

となり、これは式(1)の右辺第1項のいわゆるデータ項に定数係数を除き一致することが分かる。

4 多価関数に対する理論の拡張

前節で示された一般回帰による正則化理論はスカラーな n 次元一価関数に対する理論であるが、これを同じくスカラーな n 次元多価関数に対する理論へ拡張を行う。なお、Kronecker 積 (テンソル積) を用いれば、より一般的なベクトル関数への拡張も容易である [13] が本論文ではふれない。

4.1 一般論

志沢は標準正則化の多価関数への拡張理論の中で、多価データが同時に存在する場合のデータ拘束条件を導いた [13]。これを用いると h 価データに対するエネルギー汎関数は次式で表わされる。

$$J_3[f_1, \dots, f_h] = \int \int \prod_{i=1}^h (y - f_i(\vec{x}))^2 \rho(\vec{x}, y) d\vec{x} dy \quad (19)$$

この汎関数を最小化すると関数系 $\{f_i\}_{i=1..h}$ に対する h 元非線形連立方程式が導かれる。

一方、線形連立方程式を導くために関数 $\{-f_i(\vec{x})\}_{i=1..h}$ の基本対称式を用いて J_3 を次のように変換する。

$$J_4[F_1, \dots, F_h] = \int \int \left(\sum_{i=1}^h F_i(\vec{x}) y^{i-1} \right)^2 \rho(\vec{x}, y) d\vec{x} dy \quad (20)$$

ここで F_1, \dots, F_h は

$$\begin{aligned} F_1(\vec{x}) &= (-1)^h f_1(\vec{x}) f_2(\vec{x}) \cdots f_h(\vec{x}) \\ &\vdots \\ F_{h-1}(\vec{x}) &= \sum_{i_1=1}^h \sum_{i_2=i_1+1}^h f_{i_1}(\vec{x}) f_{i_2}(\vec{x}) \\ F_h(\vec{x}) &= -\sum_{i=1}^h f_i(\vec{x}) \end{aligned} \quad (21)$$

J_4 の最小化によって各 F_i に関して線形な連立方程式が得られる。

$$\begin{aligned} \int y^0 \left(\sum_{i=1}^h F_i(\vec{x}) y^{i-1} \right) \rho(\vec{x}, y) dy &= 0 \\ &\vdots \\ \int y^{h-1} \left(\sum_{i=1}^h F_i(\vec{x}) y^{i-1} \right) \rho(\vec{x}, y) dy &= 0 \end{aligned} \quad (22)$$

これを解いて $\{F_i(\vec{x})\}_{i=1..h}$ を求め、もとの関数系 $\{f_i\}_{i=1..h}$ に変換すれば h 個の 1 価関数の組が解として得られる。

ここで、式 (22) から得られる多重解の性質について述べておく。式 (19) のエネルギー汎関数 J_3 から明らかなように、 h 個の曲面 $\{z = f_i(\vec{x})\}_{i=1..h}$ のうち、いずれか 1 つが $y = f(\vec{x})$ を満たせば J_3 は停留値をとることが分かる。従ってこの場合には残りの $h-1$ 個の曲面はどんなにデータから離れていても解としては許されることになる。このことは換言すればデータが存在しない空間にも曲面が得られることを示唆している。実際、多くの場合においてこのような解が得られるが、5.2 節ではこの問題に対処する 1 つの方法として、局所的に合理的な解を選択するアルゴリズムについて述べる。

4.2 2 価関数に対する正則化解

ここでは J_4 で $h = 2$ の場合に対する解を求めよう。

エネルギー汎関数は、

$$J_5[F_1, F_2] = \int \int (y^2 + F_2(\vec{x})y + F_1(\vec{x}))^2 \rho(\vec{x}, y) d\vec{x} dy \quad (23)$$

変分を実行すると次の2元連立方程式が導かれる。

$$\begin{aligned}\int (y^2 + F_2(\vec{x})y + F_1(\vec{x})) \rho(\vec{x}, y) dy &= 0 \\ \int y (y^2 + F_2(\vec{x})y + F_1(\vec{x})) \rho(\vec{x}, y) dy &= 0\end{aligned}\quad (24)$$

この連立方程式の解は、 $m_n(\vec{x}) = \int y^n \rho(\vec{x}, y) dy$ と置けば、

$$F_1(\vec{x}) = \frac{m_1(\vec{x})m_3(\vec{x}) - m_2(\vec{x})^2}{m_0(\vec{x})m_2(\vec{x}) - m_1(\vec{x})^2} \quad (25)$$

$$F_2(\vec{x}) = \frac{m_1(\vec{x})m_2(\vec{x}) - m_0(\vec{x})m_3(\vec{x})}{m_0(\vec{x})m_2(\vec{x}) - m_1(\vec{x})^2} \quad (26)$$

f_1, f_2 は最終的に次のように求められる。

$$f_1(\vec{x}), f_2(\vec{x}) = \frac{-F_2(\vec{x}) \pm \sqrt{F_2(\vec{x})^2 - 4F_1(\vec{x})}}{2} \quad (27)$$

ところで、式(25),(26)で解が存在するためには右辺の分母 $m_0(\vec{x})m_2(\vec{x}) - m_1(\vec{x})^2$ がゼロでないことが必要である。 $\rho(\vec{x}, y)$ として式(12)を用いると

$$\begin{aligned}m_0(\vec{x})m_2(\vec{x}) - m_1(\vec{x})^2 &= \sum_{i,j}^N (\sigma_{2_i}\sigma_{2_j} + y_i^2 - y_i y_j) G(\vec{x} - \vec{x}_i, \sigma_{1_i}) G(\vec{x} - \vec{x}_j, \sigma_{1_j}) \\ &= \sum_{\substack{i=1 \\ j \geq i+1}}^N (2\sigma_{2_i}\sigma_{2_j} + (y_i - y_j)^2) G(\vec{x} - \vec{x}_i, \sigma_{1_i}) G(\vec{x} - \vec{x}_j, \sigma_{1_j}) \\ &\quad + \sum_i^N \sigma_{2_i}^2 G(\vec{x} - \vec{x}_i, \sigma_{1_i})^2 \\ &\geq 0\end{aligned}\quad (28)$$

が成立する。従って $m_0(\vec{x})m_2(\vec{x}) - m_1(\vec{x})^2 = 0$ となるのは (1) $|\vec{x}| = \infty$ あるいは (2) $\sigma_{2_i} = 0$ かつ $y_i = y_j$ の場合だけである。(1) の場合は有限の領域をもつデータに対しては意味を持たないので実際問題としては (2) の場合のみを注意すればよい。

ここで一般回帰による正則化の実例を示そう。図1には1価データに対する正則化の例を、図2には1価データと2価データが混在した場合に対する例を示した。なお、 $\sigma_{1_i} = \sigma_1, \sigma_{2_i} = \sigma_2$ とし、図1では $\sigma_1 = 0.01, \sigma_2 = 0$ とし、図2では $\sigma_1 = 0.05, \sigma_2 = 0$ とした。

図1を見ると1価関数に対する正則化解はシグモイド状であるのに対し、2価関数に対する2つの解は $f(x) = 1$ と $f(x) = 2$ とに分離していることが分かる。

一方、図2では1価関数に対する解は $x = 1/2$ 付近に存在する2価データの影響により階段状になっているのに対し、2価関数に対する解は依然として $f(x) = 1$ と $f(x) = 2$ とに分離していることが分かる。

5 線過程を用いない不連続関数再構成アルゴリズム

不連続関数を与えられた離散データから再構成する場合、標準正則化に線過程を導入した拡張理論では問題が一般に非線形最適化問題になる。従って大域的最適解を得ることが難しい。

ここでは、従来の線過程を導入することなく不連続を異なる関数の境界として捉えることで不連続関数を離散データから再構成するアルゴリズムを導く。

このアルゴリズムは2つの部分からなる。1つは大域的最適解として得られた h 価データに対する正則化解を用いて、 h 枚の回帰曲面が同時に存在した場合の観測データと回帰曲面間の2乗誤差を計る多重エネルギー密度関数を定義し、この値の大小を比較することで観測データの多重度を局所的に判定する多重度判定アルゴリズムである。2つめは先の多重度判定アルゴリズムにより多重と判定された領域で、実際のデータに適合する解のみを選択する関数選択アルゴリズムである。

5.1 多重度判定アルゴリズム

次式で表わされる多重エネルギー密度関数 ϵ_h を定義する。

$$\epsilon_h(\vec{x}) = \left[\int \prod_{i=1}^h (y - f_i(\vec{x}))^2 \rho(\vec{x}, y) dy \right]^{1/h} \quad (29)$$

ここで、 $\{f_i\}_{i=1..h}$ は観測データが h 価であると仮定した場合に得られる h 個の正則化解である。

さて、判定アルゴリズムはいたって簡単であり、 $\epsilon_h(\vec{x})$ が最小となる価数 h をデータの多重度とする。 $\epsilon_h(\vec{x})$ は密度関数であるからこの判定アルゴリズムによって局所的に多重度を求めることができる。

ϵ_h は h 価データに対するエネルギー汎関数 J_3 が停留値をとる場合の独立変数 \vec{x} の条件付密度関数である。このことから ϵ_h は h 枚の回帰曲面が独立に存在するのではなく、 h 枚対で存在する時の回帰曲面とデータとの2乗誤差密度を表わしていると解釈できる。従ってここで述べた多重度判定アルゴリズムは回帰曲面とデータとの誤差の大小に着目し、2乗誤差が最も小さくなる多重度を採用するものである。なお、 $h = 1$ 、すなわち観測データには重なりがないと判定された領域では $h = 1$ に対する正則化解を最終的な解とするが、 $h \geq 2$ と判定された領域では次節で示す関数選択アルゴリズムにより観測データに適合した解を最終的な解とする。

5.2 関数選択アルゴリズム

4.1節で述べたように、多価データに対する正則化では観測データに適合しない解が得られる場合がある。このような解を取捨選択するために、本節では観測データに適合した解を局所的に選択するアルゴリズムを示す。

式(29)で定義された多重エネルギー密度 ϵ_h を用いて、観測データが h 価であると仮定した場合に得られる h 重解 (ただし、 $h \geq 2$) $\{f_i\}_{i=1..h}$ および観測データは 1 価であると仮定した際に導かれる 1 重解 f_s について 1 重エネルギー密度 ($\epsilon_{h=1}$) を計算した結果をそれぞれ $\{\epsilon_{[i]}\}_{i=1..h}, \epsilon_{[s]}$ と書く。

関数選択アルゴリズムはエネルギー密度が次式の条件を満足する全ての解を選択するものである。

$$\epsilon_{[i]}(\vec{x}) \leq \epsilon_{[s]}(\vec{x}) + \min(\{\epsilon_{[j]}(\vec{x})\}_{j=1..h}) \quad (30)$$

ただし、 $\min(\{\epsilon_{[j]}(\vec{x})\}_{j=1..h})$ は \vec{x} における $\{\epsilon_{[j]}(\vec{x})\}_{j=1..h}$ の最小値を表わす。

$\{\epsilon_{[j]}(\vec{x})\}_{j=1..h}$ は h 重解が対ではなく単独で存在する場合の各回帰曲面とデータとの 2 乗誤差密度を表わしている。従ってこれら $\{\epsilon_{[j]}(\vec{x})\}_{j=1..h}$ の最小値に対応した解 f_i が最も観測データの近くに存在していることになる。よって最も信頼できる解 $f_{[i]}(\vec{x})$ は $\epsilon_{[i]}(\vec{x}) \leq \min(\{\epsilon_{[j]}(\vec{x})\}_{j=1..h})$ を満足する。一方、多重度が h 重である領域では異なる i, j に対して $|\epsilon_{[i]}(\vec{x}) - \epsilon_{[j]}(\vec{x})| > \epsilon_{[s]}(\vec{x})$ を満たす多重解は不合理である。なぜなら $\epsilon_{[i]}(\vec{x})$ と $\epsilon_{[j]}(\vec{x})$ との差が、回帰曲面が 1 重であると仮定して計算したエネルギー密度 $\epsilon_{[s]}(\vec{x})$ 以上ある領域では、解としては 1 重解を採用したほうが 2 乗誤差は少なくなるからである。

6 不連続関数再構成実験

ここでは空間次元が 1 次元と 2 次元の場合に対してそれぞれ 2 例ずつの再構成実験を行った。実験 1、2 は 1 次元、実験 3、4 は 2 次元である。問題を簡単にするため、観測データの多重度の上限は 2 であると仮定し、データのスケールパラメータ σ_1 および σ_2 にはそれぞれ同一の値を持たせた。また、観測データは原関数からランダムサンプリングし、標準偏差 σ 、平均値 0 の正規ノイズを加えた。実験に用いた観測データ数 N と各パラメータ値 σ_1, σ_2 および σ を表 1 に載せた。

図 3 は実験 1 の結果である。図 3-(a) の原関数と比較して図 3-(b) の再構成結果は全域で良好な結果を得ていることが分かる。しかし、注意する点が 2 つある。1 つは再構成された関数は $x = 0.3$ および $x = 0.7$ 付近で関数の重なりが見られること

である。これは関数選択アルゴリズムにおいて用いられた条件式 (30) から 2 重解を許す領域が存在することに原因がある。予めデータが 1 価であることが分かっているときは、これらの条件式において $\epsilon_{[s]} = 0$ とすれば 2 重解は許されず、常に 1 価関数が再構成される。注意点の 2 つめは $x = 0.3$ と $x = 0.7$ に存在する真の不連続点以外にいくつかの不連続点が見られることである。これらの不連続点は多重度判定アルゴリズムにより判定された多重度の不連続位置に相当する。

図 4 には実験 2 の結果を示した。再構成された関数は全域で原関数をよく表わしていることが分かるが、実験 1 と同様、真の不連続以外の不連続点が存在する。

2 次元 1 価データに対する結果を図 5 に表わした。図 5-(a) の原関数は $1/4 \leq x_1 \leq 3/4, 1/4 \leq x_2 \leq 3/4$ では $f(x_1, x_2) = 2$ でそれ以外の領域では $f(x_1, x_2) = 1$ となる関数である。図 5-(b) の再構成関数では関数の定義域の端の付近に空隙が見られるが、これはデータ表示の問題であり、実際には空隙は存在せず、実験 1、2 と同様の真の不連続以外の不連続点のみが存在する。また、原関数の $f(x_1, x_2) = 2$ に相当する再構成関数は 4 隅が丸みを帯びている。この原因はスケールパラメータ値を空間に対して均一にしたことにあると考えられる。

図 6 には 2 次元で 1 価データと 2 価データが混在する場合の正則化結果を示した。図 6 -(a) の原関数は $1/4 \leq x_1 \leq 3/4, 1/4 \leq x_2 \leq 3/4$ では $f(x_1, x_2) = 2$ となる関数と全領域で $f(x_1, x_2) = 1$ となる関数から構成されている。図 6-(b) の再構成関数では図 5-(b) と同様に多重度の不連続位置に空隙が見られる。

4 例の再構成実験の結果から、5 節で提案した不連続関数再構成アルゴリズムは有効に機能していることが分かった。また、観測データにはノイズが加えられているにも関わらず、再構成された関数はいずれも原関数を全域でよく近似していることが分かった。

7 結び

本論文では一般回帰による正則化理論を取り上げ、標準正則化およびこれを拡張した理論において重要な役割を演じる滑らかさの尺度を一切必要としない正則化手法について論じた。また、この正則化理論を多価データの正則化を行えるように拡張し、さらに線過程を導入することなしに不連続関数を与えられた離散データから再構成するアルゴリズムを示した。最後にこれらの理論、アルゴリズムの妥当性を観測データが 2 価までの場合に対して計算機実験によって示し、ノイズがある場合も良好に再構成が実行できることを示した。

本論文で示した不連続関数構成アルゴリズムは非常に単純なものであり、不連続

位置を推定するために関数の微分を計算したり、関数の滑らかさを計るための評価量を導入する必要は全くなかった。従来の標準的な不連続の取り扱いでは、線過程と画像の強度過程とを分離して定式化していたのに対して、本論文では不連続を異なる関数の境界と見なすことで不連続を直接取り扱うことを避けた。これにより線形理論の枠組で不連続関数を再構成することが可能となった。

今後に残された課題は2つある。1つは任意の多重度を持つデータに対して提案した不連続関数再構成アルゴリズムが実際に機能するかを検証することである。もう1つは推定された密度分布に含まれるスケールパラメータを与えられたデータのみから決定する手法を確立することである。この問題に対しては最尤法や ABIC (ベイズ情報規範) の最小化によりパラメータ推定を行ったり、あるいは GCV (Generalized Cross Validation)[14] を拡張し、多価関数に対して適用可能な理論を構築することが一つの解決策であると考えている。

今後はこの2つの課題を検証および解決するとともに、本論文の結果を踏まえ汎用性に富む正則化ネットワークを構築し、コンピュータビジョンにおける具体的な問題に応用したいと考えている。

謝辞

本研究の基礎となった一般回帰による正則化理論に関し、文献 [9] を紹介して頂いた志沢雅彦博士を初め、ATR 人間情報通信研究所の皆様へ感謝致します。また、励ましを頂いた東芝 研究開発センター 情報・通信システム研究所 第3 研究所の麻田治男所長へ感謝致します。

参考文献

- [1] Poggio T., Torre V. and Koch C.: "Computational vision and regularization theory," *Nature*, **317**, pp.314-319(1985)
- [2] Tikhonov A. N.: *Solutions of Ill-Posed Problems*, Washington, DC, Winston and Sons(1977)
- [3] Duchon J: "Spline minimizing rotation-invariant semi-norms in Sobolev spaces," *Constructive Theory of Functions of Several Variables*, Berlin, Springer-Verlag(1977).
- [4] Meinguet J.: "Multivariate interpolation at arbitrary points made simple," *J. Appl. Math. Phys.*, **30**, pp.292-304(1979)
- [5] Terzopoulos D.: "The computation of visible-surface representations," *IEEE Trans. PAMI*, **10**, 4, pp.417-438(1988)
- [6] Geman S. and Geman D.: "Stochastic relaxation, Gibbs distribution and the Bayesian restoration of images," *IEEE Trans. PAMI*, **6**, pp.721-741(1984)
- [7] Koch C., Marroquien J. and Yuille A.: "Analog "neuronal" networks in early vision," *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, **83**, pp.4263-4267(1986)
- [8] Sonehara N.: "Binary representation and intensity surface interpolation of the gray level image by relaxation neural network models," *Proc. of the second IEEE symposium on PDP*, pp. 420-427(1990)
- [9] Specht D.: "A general regression neural network," *IEEE Trans. Neural Networks*, **2**,6, pp.568-576(1991)
- [10] Poggio T. A. and Girosi F.: "Networks for approximation and learning," *Proc. IEEE*, **78**, 9, pp.1481-1497(1990)
- [11] Parzen E.: "On estimation of a probability density function and mode," *Ann. Math. Statist.*, **33**,pp.1065-1076(1962)
- [12] Cacoullos T.: "Estimation of a multivariate density," *Ann. Inst. Statist.*, **18**,,2,pp.179-189(1966)

- [13] 志沢 雅彦: “標準正則化理論の多価関数への拡張: なめらかな多重表面の復元,”
信学論 D-II(採録決定済み), 受付番号 93JD-4396
あるいは
志沢 雅彦: “標準正則化理論の多価関数への拡張と多重表面の復元,” 信学技報,
NC93-34, pp.25-32(1993)
- [14] Wahba G.: *Spline Models for Observational Data*, pp.45-65, Philadelphia, PA,
SIAM(1990)

表 1: 実験に用いたデータ値

exp.#	N	σ_1	σ_2	σ
1	200	1.00×10^{-2}	1.00×10^{-5}	1.00×10^{-2}
2	200	2.00×10^{-2}	1.00×10^{-5}	1.00×10^{-2}
3	800	6.67×10^{-2}	1.00×10^{-5}	1.00×10^{-2}
4	800	6.67×10^{-2}	1.00×10^{-5}	1.00×10^{-2}

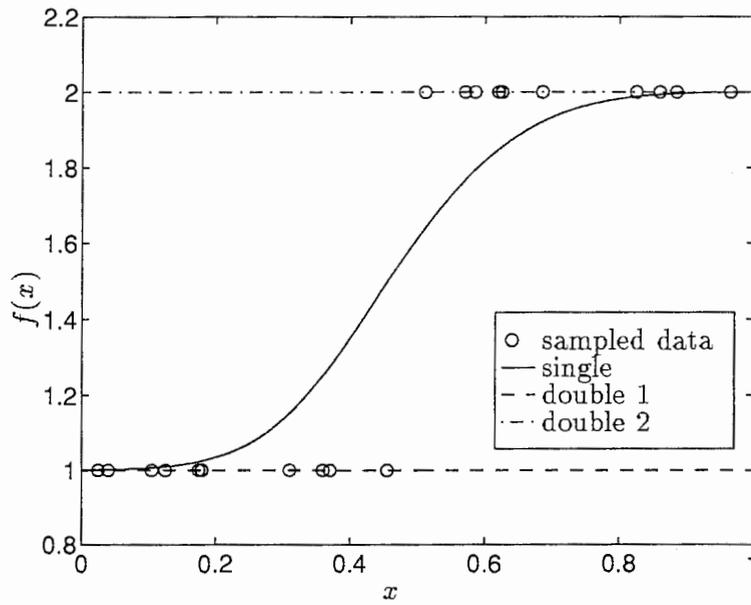


図 1: 1 価データに対する正則化の例

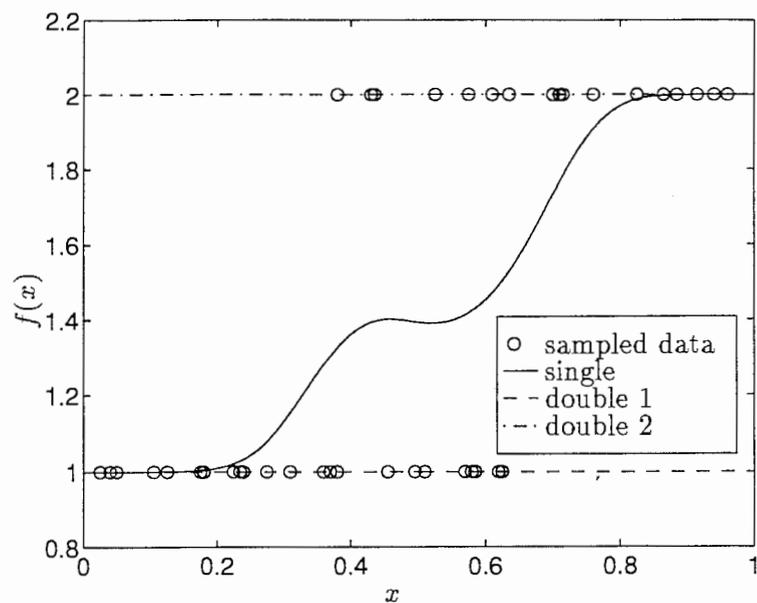


図 2: 1 価データと 2 価データが混在した場合に対する正則化の例

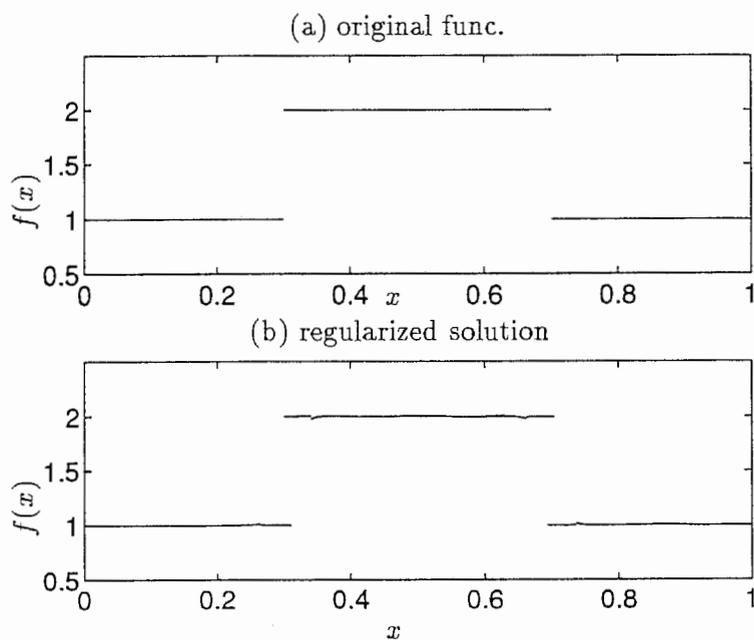


図 3: 実験 1 の結果

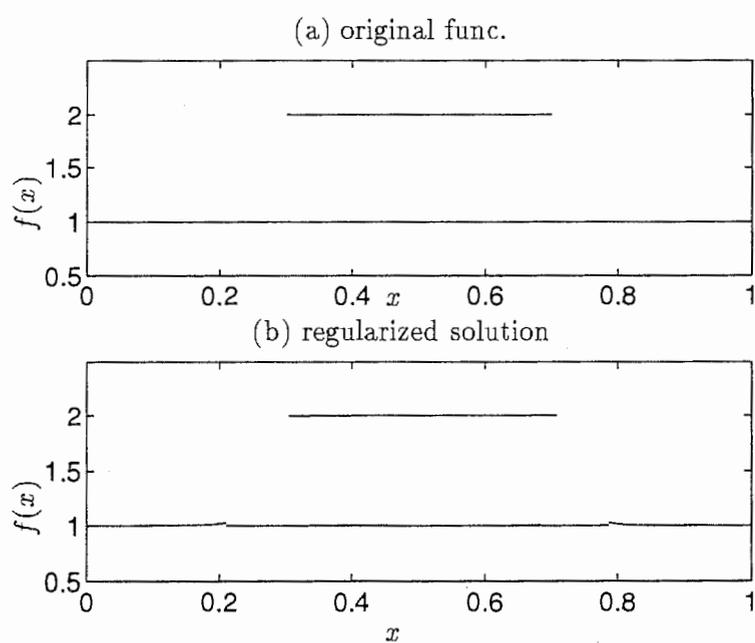
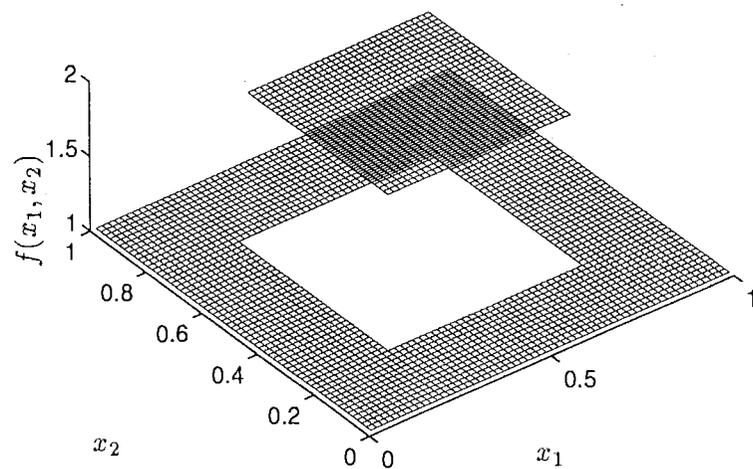


図 4: 実験 2 の結果

(a) original func.



(b) regularized solution

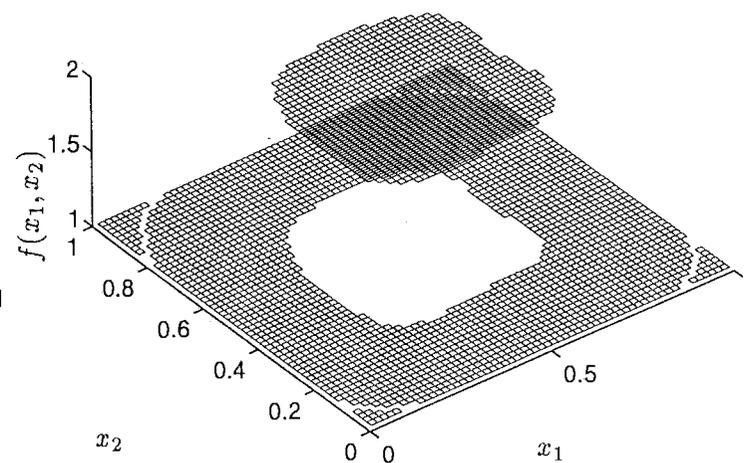
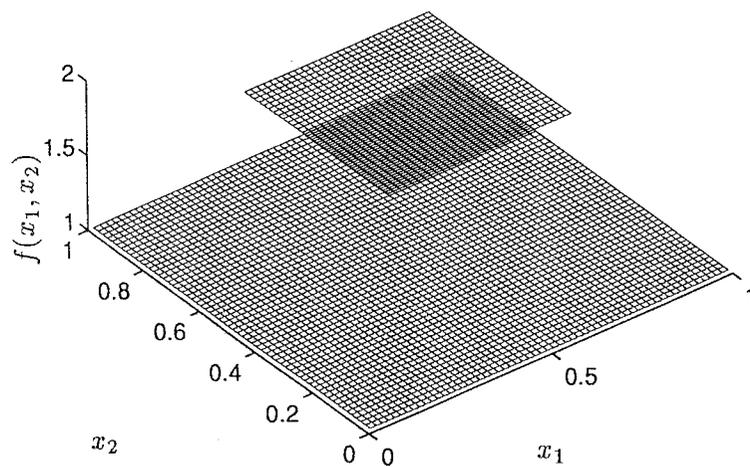


図 5: 実験 3 の結果

(a) original func.



(b) regularized solution

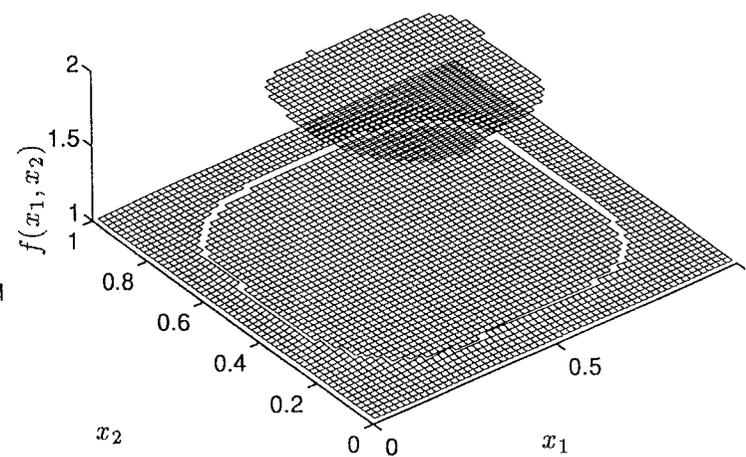


図 6: 実験 4 の結果