

周期境界パーシステントホモロジーと時系列データ物体検出

織田 遥向¹

¹ 東京大学

e-mail : haruhisa-oda0722@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

1 はじめに

時系列データ内の物体検出は画像解析の基本的なテーマの一つであり、セグメンテーションの後にトラッキングを行うことが多いが、本発表では時間軸を含めた空間内での図形の検出技術としてのアプローチをとる。単純に 2 値画像で n 次元空間内を物体が移動している場合は、時間軸を加えた $n+1$ 次元空間内での連結成分の検出で十分であるが、図形が重なり合っている、グレイスケールの閾値設定が難しいなど、より高度な手法が必要となる場合もある。関連した研究 [1, 2] も取り上げつつ、周期境界パーシステントホモロジー (PH)(PH については [3, 4, 5] などを参照) を用いた技術を導入する。PH の計算は HomCloud[6] を利用している。

2 問題の定式化と関連研究

\mathbb{R}^n 内の物体は物体外部に注目すれば n 次元球面 S^{n-1} とホモトピー同値として検出できる。これが 1 次元の区間 $I \subset \mathbb{R}$ である時間軸にそって運動するので $\mathbb{R}^n \times I$ 内の $S^{n-1} \times I$ を検出することが課題である。ただし、時系列の途中で物体が接触・分裂などを行う際にはこの限りではない。

[1] は時系列データの文脈ではないが、岩石を貫通している亀裂を扱っており、上記で $n=2$ とした場合が当てはまる。ここでは $S^1 \times I \simeq S^1$ を H_1 で検出している。この方法は内部の亀裂 S^2 を無視して外部とつながっている亀裂のみを検出できる利点がある。一般の次元では H_{n-1} を用いて検出すればよい。[2] は 2 次元の物体トラッキングの文脈で相対ホモロジーを用いた検出を行っている。ここでは時系列の始点および終点を同値関係で一点とみなすことで $S^2 \simeq S^1 \times I / \sim$ を H_2 で検出している。この方法では時系列の途中にのみ存在する S^2 も同時に検出できる。分離したい場合は同値関係を入れない結果と比較すればよい。また、一般次元でも同様に H_n で検出すればよい。

3 周期境界パーシステントホモロジーによる時系列データ物体検出

今回提案する手法は $S^{n-1} \times I$ の上下を周期境界で同一視することで $S^{n-1} \times S^1$ とし、 H_n で検出する。また、 H_{n-1} にも有用な情報があるため記録する。実際のデータでは周期境界で貼り合わせる上下が一致するとは限らないため、元の時系列データを時間軸を反転させたものと貼り合わせて（順再生と逆再生をつなぐ）対称な時系列としてから解析を行う。

$n=2$ の場合の $S^1 \times S^1$ のホモロジー群は係数を体 \mathbb{K} としたとき $H_0 = H_2 = \mathbb{K}, H_1 = \mathbb{K} \oplus \mathbb{K}, H_i = 0 (i \neq 0, 1, 2)$ であるが、 $n \geq 3$ の場合、 $H_0 = H_1 = H_{n-1} = H_n = \mathbb{K}, H_i = 0 (i \neq 0, 1, n-1, n)$ であり、2 次元と 3 次元以上で対象の性質が異なるように見える。しかしながら、PH の essential class を考慮すると、統一的に H_0, H_1 に essential class として 1 つずつ、 H_n, H_{n-1} に non-essential class として 1 つずつバーが存在することになる。

4 単純な 2 値画像での考察

まずは 2 次元 2 値画像内の物体が運動する場合のモデルを取り上げる。入力画像を signed Euclidean distance transform で変換し、時間軸について周期境界を設定して、sublevel filtration

の PH を用いる。消滅点が正の値で、ある程度の長さを持つバーを有意義な物と考えると、周期境界での H_2 からは相対ホモロジーの H_2 、周期境界での H_1 からは通常ホモロジーの H_1 に対応した結果が得られる。これは実際にホモロジーの基底をたどると納得できる。3次元でも同様である。Stable volume[7] を用いた逆解析を行う際、周期境界 H_2 では時系列データ全体に渡って検出されるのに対し、通常の H_1 ではある時点の 1 次のループ構造のみが検出される。簡便なトラッキングツールとしても周期境界 H_2 は有用である。複数の物体が存在する場合には、PH の結果は入れ子構造をとることには留意が必要である。

5 重なり合いのあるグレイスケール画像の扱い

重なり合いや図形の下図の変化のあるグレイスケール画像に対して、2 値化処理後に signed Euclidean distance transform を行った結果およびグレイスケールそのものに sublevel filtration を行って周期境界 PH を計算すると、図形に対応するバーが確認できる。Stable volume を用いた解析では、図形の分裂を反映する入れ子構造の結果を見ることができる (図 1)。

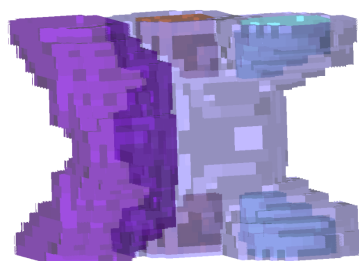


図 1. 図形の分裂を反映した stable volume による描画の結果。

参考文献

- [1] A. Suzuki et al., Flow estimation solely from image data through persistent homology analysis, *Scientific Reports*, 11. (2021), 17948.
- [2] R. Assaf et al., 2D+t track detection via relative persistent homology, *International Journal of Imaging Systems and Technology*, 31. (2021), 753–762.
- [3] V. Robins, Toward computing homology from finite approximations, *Topology Proceedings*, 24. (1999), 503–532.
- [4] H. Edelsbrunner, D. Letscher and A. Zomorodian, Topological persistence and simplification, *Discrete & Computational Geometry*, 28. (2002), 511–533.
- [5] A. Zomorodian and G. Carlsson, Computing persistent homology, *Discrete & Computational Geometry*, 33. (2005), 249–274.
- [6] I. Obayashi, T. Nakamura and Y. Hiraoka, Persistent homology analysis for materials research and persistent homology software: HomCloud, *Journal of the Physical Society of Japan*, 91. (2022), 091013.
- [7] I. Obayashi, Stable volumes for persistent homology, *Journal of Applied and Computational Topology*, 7. (2023), 671–706.

最適化手法を用いた海洋生態系モデルパラメータの同定

鈴木 彩¹, 小林 高士¹, 久田 正樹¹, 米倉 一男²¹ 日本電信電話株式会社 宇宙環境エネルギー研究所, ² 東京大学大学院 工学系研究科 システム創成学専攻

e-mail : aya.suzuki@ntt.com

1 はじめに

生物多様性保全に向け、人間活動等から影響を受ける海洋生態系の量的変化を捉えることが重要である。その変化を予測する方法に海洋生態系モデル [1] がある。我々は高精度なモデルを効率的に構築する技術の確立をめざしている。海洋生態系モデルの構築では、データ収集やチューニングが必要となる。得られるデータから短い時間で高精度な海洋生態系モデルを構築するために、最適化が有効と思われる。本研究ではモデル構築効率化に向け、最適化によるパラメータ同定について検証した。

2 閉鎖水槽の海洋生態系モデル

検証ユースケースには、図 1 に物質循環プロセスを表す閉鎖水槽での植物プランクトン培養実験を選定した。実験データを取得し、5 元連立微分方程式、

$$\frac{dC}{dt} = (1 - \varepsilon)P_r C - k_r C - k_d C, \quad (1)$$

$$\frac{dN_i}{dt} = \alpha_{NC}(k_r - P_r)C + \gamma_{No}N_o - \gamma_{Ni}N_i, \quad (2)$$

$$\frac{dN_o}{dt} = \alpha_{NC}(k_d + \varepsilon P_r)C - \gamma_{No}N_o, \quad (3)$$

$$\frac{dP_i}{dt} = \alpha_{PC}(k_r - P_r)C + \gamma_{Po}P_o, \quad (4)$$

$$\frac{dP_o}{dt} = \alpha_{PC}(k_d + \varepsilon P_r)C - \gamma_{Po}P_o. \quad (5)$$

から成る海洋生態系モデルを構築した。ここで、 C :クロロフィル a 濃度 [mg/L], N_i :無機態窒素濃度 [mg/L], N_o :有機態窒素濃度 [mg/L], P_i :無機態リン濃度 [mg/L], P_o :有機態リン濃度 [mg/L], t :時間 [hour], P_r :光合成項 $P_r = \mu_{\max} \frac{N_i}{N_i + K_N} \frac{P_i}{P_i + K_P} \frac{I}{I_{\text{opt}}} \exp(1 - \frac{I}{I_{\text{opt}}}) \frac{T}{T_{\text{opt}}} \exp(1 - \frac{T}{T_{\text{opt}}})$, T :水温 [°C], I :日射量 [MJ/m²/hour], 及び 13 の定数パラメータを含む。

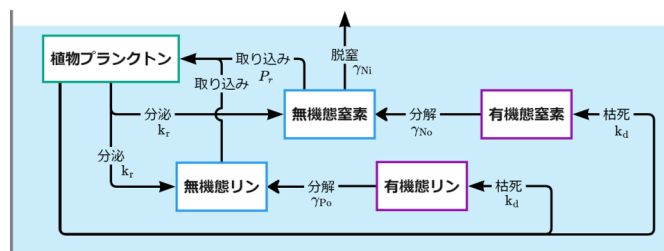


図 1. 植物プランクトン培養槽の物質循環

定数パラメータは生物種や環境に依存し、従来は実験や専門家の調整により値が決定されていた。本研究では、グリッドサーチとベイズ最適化 [2] を用いて 13 の定数パラメータの同定を試みるため、評価関数を実験値との誤差を評価する RMSE（平均二乗平方根誤差）として、

$$f(x_1, \dots, x_{13}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (C_i - \widehat{C}_i)^2} \quad (6)$$

と定義する。ただし、 C_i 及び \widehat{C}_i はそれぞれクロロフィル a 濃度の実験値及びシミュレーション値、 N は実験値の数とする。

3 グリッドサーチ及びベイズ最適化によるモデルパラメータ同定

まず、13 パラメータが取り得る値の範囲を網羅的に探索するグリッドサーチを実施した。13 パラメータの全組合せ分をシミュレーションすると計算量が膨大となるため、パラメータを 2 分類した上で 2 段階の実施とした。生物種により変動の大きい 5 パラメータを 1 段階目、それ以外を 2 段階目とし、順にグリッドサーチにより評価関数最小となるパラメータを探索した。その結果、評価回数 91,935 回で最も良い評価値は 0.005203[mg/L] となった。

次に、評価関数を目的関数としたベイズ最適化によるパラメータ同定を実施した。パラメータセットをランダム生成し、シミュレーション結果を評価した上で、ガウス過程回帰により事後分布を取得し、獲得関数を使用して目的関数最小となるパラメータを探索した。獲得関数 (EI, PI, LCB) や候補点数の条件を変更し、各条件で 600 回探索した結果を図 2 の左側に示す。グリッドサーチより少ない探索回数で近い評価値に辿り着いたが改善には至らなかった。獲得関数を比較すると、LCB が他よりも良い評価値を示す傾向があったことから、局所最適解に陥りやすい EI や PI に関しては、パラメータ数が多いことから、探索回数が進むにつれ特定のパラメータに注力するような偏りが発生し最適化が停滞したと推察できる。

そこでパラメータの偏りを防ぐことを目的に、グリッドサーチと同様にパラメータを 2 分類し 2 段階のベイズ最適化を実施した。図 2 の右端に結果を示すように、2 段階のグリッドサーチよりも評価値が改善された。最適化が特定のパラメータに集中する確率が削減できたと考えられる。特に獲得関数 EI において最も評価値が改善できた。この条件で同定されたパラメータを用いたクロロフィル a 濃度の時間変化は、図 3 に示すように実験結果を良く再現している。

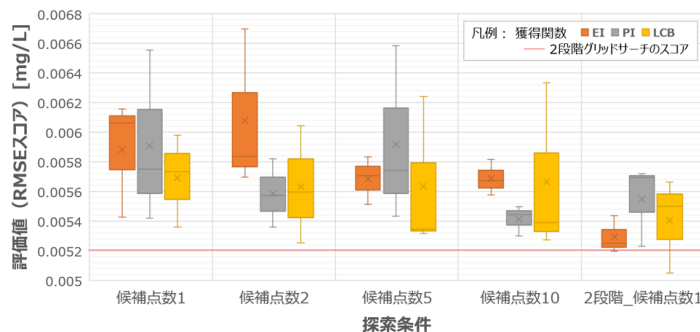


図 2. 最適化条件毎の評価値 (RMSE スコア)

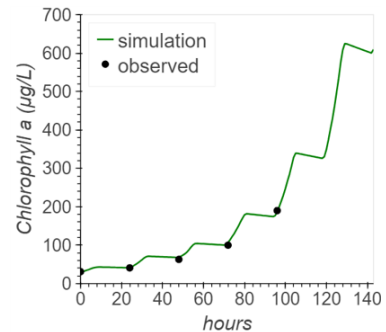


図 3. シミュレーション結果

4 まとめ

最適化手法が海洋生態系モデルのパラメータ同定に有効であることを示した。特に、探索コスト削減や最適化パラメータの偏りを防ぐため、生態系の特徴を解釈した上でパラメータを分類し段階的にベイズ最適化を行う方法が最も効率的であった。

参考文献

- [1] 岸道郎, 海洋生態系の数値モデル研究, 海の研究, 17.1 (2008), 7–18.
- [2] 尾崎嘉彦, 野村将寛, 大西正輝, 機械学習におけるハイパーパラメータ最適化手法: 概要と特徴, 電子情報通信学会論文誌 D, 103.9 (2020), 615–631.

有限フレネル変換による最適直交帯域制限関数

青柳 智裕¹, 大坪 紘一¹

¹ 東洋大学総合情報学部

e-mail : t-aoyagi@toyo.jp

1 概要

フレネル変換は光の回折を表すが、ヒルベルト空間におけるユニタリな有界線形作用素として数学的に定式化される [1]。これまで空間的な帯域制限の効果はフーリエ変換の形をしているフラウンホーファー回折について考察されてきた。有限フーリエ変換について、スフェロイド関数が有効であることがすでに認識され数学的に一般化もされている [2]。円形開口の系を考慮したフレネル変換における帯域制限関数については、Fourier-Bessel 展開をすることにより、フレネル変換対に対する標本化定理が導出されている [3]。本研究では、ヒルベルト空間において帯域制限された関数のノルムを最大化することによる変分問題から積分方程式を導き、その関数系の性質と計算方法ならびに応用について考察する。

2 フレネル変換と帯域制限関数

振幅透過率 $f(\xi, \eta)$ を持つ平面物体に光が入射したとき、そこから距離 z だけ後方にある観測面での光の振幅分布を $g(x, y; z)$ とする。フレネル近似のもとで $g(x, y; z)$ は次のように表される。

$$g(x, y; z) = \frac{k \exp(ikz)}{i2\pi z} \iint_{-\infty}^{\infty} f(\xi, \eta) \exp \left[\frac{ik}{2z} \{ (x - \xi)^2 + (y - \eta)^2 \} \right] d\xi d\eta. \quad (1)$$

ここで、 k は光の波数、 $i = \sqrt{-1}$ とする。また、フレネル逆変換は式 (1) において $f(\cdot, \cdot)$ と $g(\cdot, \cdot)$ を入れえ、 k を $-k$ と置いたものになる。

以下では議論を簡明にするため、1 次元のフレネル変換について考察する。有限領域 R において内積 (電力) が一定となる入力パターンを仮定する。さらにフレネル変換面の有限領域 S における内積が最大となるような関数を求める。

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |g(x, z)|^2 dx, \quad P_R = \int_R |f(\xi)|^2 d\xi, \quad P_S = \int_S |g(x, z)|^2 dx. \quad (2)$$

これをラグランジュの未定係数法によって解くと、次のようなフレドホルム型第一種積分方程式の固有値問題を導出することができる。

$$\int_R K_S(\xi, \xi') \varphi(\xi') d\xi' = \lambda \varphi(\xi) \quad (3)$$

ここで、積分核は次のように表される。

$$K_S(\xi, \xi') = \frac{1}{2\pi z} \exp \left\{ -\frac{i}{2z} (\xi^2 - \xi'^2) \right\} \int_S \exp \left\{ \frac{i}{z} (\xi - \xi') x \right\} dx. \quad (4)$$

積分方程式の核は正定値となり、固有値は非負となる。積分方程式の最大固有値を λ_{max} とすると、 P_S の最大値 P_{S-max} は次のようになる。

$$P_S \leq P_{S-max} = \lambda_{max} P. \quad (5)$$

この積分方程式を解析的に解くことは難しいため、コンピュータにより数値的に解くことを考える [4, 5]。その場合、積分範囲と積分核を離散化することにより、 n 次元のエルミート行列の固有値問題に帰着する。

定理 1 空間的な帯域制限関数 $\psi(\xi, z)$ に対して、有限領域 S におけるフレネル変換のエネルギーを最大化するような最適な関数は、最大固有値に対する固有関数に一致する。

定理 2 固有関数系は二重の直交性を有する。つまり次の式が成り立つ。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_m(\xi) \varphi_n^*(\xi) d\xi = \frac{1}{\lambda_m \lambda_n} \int_R \int_R \varphi_m(\xi') \varphi_n^*(\xi'') K_S^*(\xi', \xi'') d\xi' d\xi'' = \frac{1}{\lambda_m} \int_R \varphi_m(\xi') \varphi_n^*(\xi') d\xi' = 0. \quad (6)$$

$*$ は、複素共役、 $m, n \in N$ 、 $m \neq n$ とする。

定理 3 $g(x, z)$ が有限領域の外で零となると、そのフレネル逆変換 $f_S(\xi)$ は次の不等式を満たす。

$$\int_R |f_S(\xi)|^2 d\xi \geq \alpha^2 P, \quad \text{ただし} \quad \alpha = \frac{P_S}{P}. \quad (7)$$

証明 フレネル変換面で有限領域内での関数を $g_S(x, z)$ とし、そのフレネル逆変換を $f_S(\xi)$ とする。式 (5) から、

$$P_S = \int_S |g(x, z)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} g(x, z) g^*(x, z) dx = \int_{-\infty}^{\infty} f(\xi) f_S^*(\xi) d\xi = \int_R f(\xi) f_S^*(\xi) d\xi.$$

これに Schwarz の不等式を適用すると、

$$P_S^2 = \left| \int_R f(\xi) f_S^*(\xi) d\xi \right|^2 \leq \int_R |f(\xi)|^2 d\xi \int_R |f_S(\xi)|^2 d\xi \leq P \int_R |f_S(\xi)|^2 d\xi. \quad (8)$$

3 まとめと今後の課題

フレネル変換対において帯域制限の効果を検討して、積分方程式の固有値問題を導出した。固有関数系を解析的に表現することは難しいため、数値的に求める必要がある。積分作用素を複素数係数の行列に離散化した場合、パラメータの取り方により一般的にはエルミートにはならないので、固有関数系を数値的に求める方法が必要になる。

参考文献

- [1] N. Aoyagi, Dr.Thesis, Tokyo Institute of Technology, Tokyo (1973).
- [2] Y. Itoh, Evaluation of aberrations using the generalized prolate spheroidal wavefunctions, J. Opt. Soc. Am., 60, (1970), 10-14.
- [3] 青柳宣生, 小宮山悟, 有限開口瞳関数を有する光学系の解析, 東洋大学工学部昭和 52 年研究報告, (1977), 117-125.
- [4] T. Aoyagi, K. Ohtsubo, N. Aoyagi, Fredholm integral equation for finite Fresnel transform, 6th International Conference on Photonics, Optics and Laser Technology, Proceeding of Photoptics 2018, (2018), 286-291.
- [5] 青柳宣裕, 大坪紘一, 青柳宣生, 有限フレネル変換による固有ベクトル展開, 第 66 回応用物理学会春季学術講演会, 03-084, (2019).

Lackadaisical quantum walk を用いた long edges を持った 2 次元格子における頂点探索

渡邊 聡¹, Giri Ranjan Pulak¹

¹KDDI 総合研究所

e-mail : xsas-watanabe@kddi.com

1 概要

quantum walk は頂点グラフの目標点 (marked points) を探索する際に用いられる。本研究では quantum walk の高速化に用いられてきた Lackadaisical quantum walk の coin operator を変形することによって、従来は探索することができなかった例外的な marked points の配置の場合に非常に高い成功確率で探索できることを数値的に示す。

2 導入

Hanoi network 型の long edges を持った 1 次元格子の上の quantum walk 及び Lackadaisical quantum walk による頂点探索は [1] においてなされた。ここでは self loop を加えて Lackadaisical quantum walk にすることによって量子探索が高速化できデータ探索の成功確率も向上させられることが示された。

また周期境界条件を課した 2 次元格子の上で Hanoi network 型の long edge を持たせた場合のデータ探索は [2] においてなされた。この論文では self loop を付け加えた Lackadaisical quantum walk について研究されており、long edge を付け加えない場合はデータ数 N に対して $\mathcal{O}(\sqrt{N \log N})$ の run time で頂点探索がなされるのに対し、long edge を付け加えた場合はデータ数 N に対して $\mathcal{O}(\sqrt{N})$ の run time で頂点探索がなされることがわかる。

最近 [3] において quantum walk の coin 状態に関わる coin operator について新たな coin operator が導入された。これは従来の Grover 型の coin operator

$$C = C_0 \otimes \left(\mathbb{I}_{N \times N} - 2 \sum_{i=1}^M |t_i\rangle\langle t_i| \right), \quad (1)$$

を

$$C = \left(C_0 \otimes \mathbb{I}_{N \times N} \right) \left(\mathbb{I}_{d+1 \times d+1} \otimes \mathbb{I}_{N \times N} - 2 \sum_{i=1}^M |\text{loop}, t_i\rangle\langle \text{loop}, t_i| \right), \quad (2)$$

に変形した Lackadaisical quantum walk が導入された。従来の Grover 型 coin では探索したい marked points が $k \times 2m, 2m \times k$ ($k, m \in \mathbb{N}$) 型長方形配置の場合、および diagonal な配置の場合には Lackadaisical quantum walk を用いて成功確率を上げることができなかった。

3 結果

HN4 型の Hanoi network を横軸、および縦軸に用いた 2 次元格子の座標は 2 つの整数 $1 \leq x_v^1, x_v^2 \leq 2^n$ を用いて (x_v^1, x_v^2) と書くことができる。ここで $(2^{n-1}, x_v^2), (2^n, x_v^2), (x_v^1, 2^{n-1}), (x_v^1, 2^n)$ (x_v^1, x_v^2 は任意) は片方の軸で見たときに long edge を持たない例外的な配置の点であり従来の Lackadaisical quantum walk では成功確率を上げることができない。次の図は $n = 5, N = 2^5 = 32$ で例外的な配置の点 $(1, 16)$ の成功確率の時間発展演算子の回数に応じた変化である。

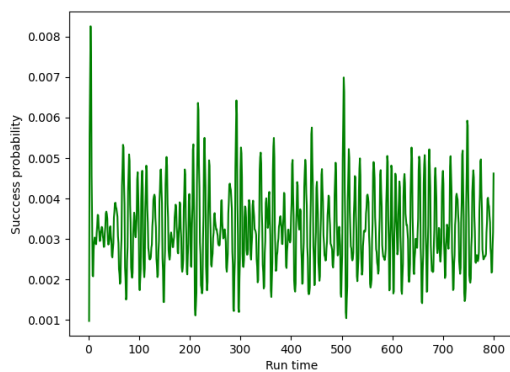


図 1. 従来の Lackadaisical quantum walk

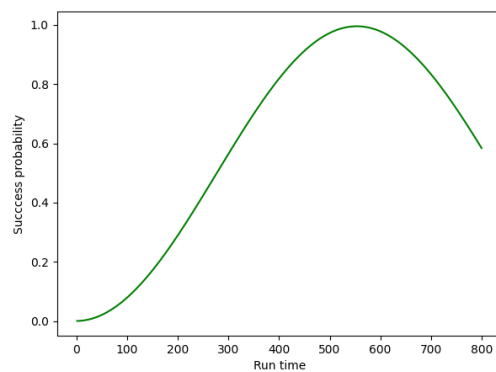


図 2. modified Lackadaisical quantum walk

このように従来の coin operator では成功確率は増幅せず、marked point の探索は成功しない。一方で変形された coin operator を用いると成功確率は 1 に非常に近い値まで増幅させることができ、marked point を探索することができる。この他に探索したい marked points が $k \times 2m, 2m \times k$ ($k, m \in \mathbb{N}$) 型長方形配置の場合、および diagonal な配置の場合にも変形された coin operator を用いると成功確率を増幅することができることが数値的に示されたため報告する。

参考文献

- [1] P.R.Giri and V.E.Korepin, Quantum search on Hanoi network, International Journal of Quantum Information, Vol. 17, No. 07,1950060 (2019).
- [2] P.R.Giri, Quantum Walk Search on a Two-dimensional Grid with Extra Edges, International Journal of Theoretical Physics, Volume 62, article number 121, (2023).
- [3] P.R.Giri, Quantum walk search by Grover search on coin space, The European Physical Journal D, Volume 77, article number 175, (2023).