

幾何学的 AIC による規則図形への自動変換

イマン・トリオノ[†] 金谷健一[†]

群馬大学工学部情報工学科

マウスにより不規則な図形を入力すると何のしきい値もなしに最も近い規則図形を判別し、それへ自動的に変換するグラフィックインターフェースを実現する。最大の問題は、バタン認識とは異なり、判別する規則図形のクラスに包含関係があることである。このため、単に何らかの距離尺度で測って最も近いクラスを選択することができない。本論文ではこの問題の本質を明らかにし、幾何学的情報量基準 (AIC) によってこれが解決することを示す。そして、その原理の概略を述べ、システム実行例を示す。

キーワード: CAD、AIC、仮説検定、モデル選択、規則性、バタン認識

Automatic Enforcement of Regularity by Geometric AIC

Iman Triono[†] and Kenichi Kanatani[†]

Department of Computer Science
Gunma University, Kiryu, Gunma 376, Japan

We implement a graphical user interface that automatically transforms a figure input by a mouse into a regular figure which the system infers is the closest to the input. The difficulty lies in the fact that unlike pattern recognition the classes into which the input is to be classified have inclusion relations among themselves. This prohibits us from choosing the closest class measured by some distance criterion. In this paper, we illucidate the issue and show that this problem can be resolved by introducing the *geometric information criterion (AIC)*. We describe the outline of the principle and show system execusion examples.

Key words: CAD, AIC, testing of hypotheses, model selection, regularity, pattern recognition

謝辞: 本研究の一部は文部省科学研究費一般研究 B(No. 07458067) および大川情報通信基金からの助成によった。

[†] 376 桐生市天神町 1-5-1 群馬大学工学部情報工学科, Tel: (0277)30-1841, Fax: (0277)30-1801,
E-mail: iman@cs.gunma-u.ac.jp, kanatani@ail.cs.gunma-u.ac.jp

1. はじめに

マウスはインタラクティブに図形を生成するための最も基本となるインターフェースであるが、問題も多い。その一つは規則図形の生成である。工業製品には対称性、直交性、平行性などの規則性の現れる頻度が高いが、マウス操作は人間の視覚に依存しているため、生成した図形は必要な規則を満すとは限らない。

そこで多くの作図ツールではあらかじめユーザがメニュー形式で特定の規則のためモードを選んだり、概形を作図した後に特定のコマンドで規則を強制したりする。これを自動化することはできないであろうか。例えば長方形に近い四辺形を入力するとシステムが長方形に近いと判定して、それに最も近い長方形に自動変換する、正方形に近い四辺形を入力するとシステムが正方形に近いと判定して、それに最も近い正方形に自動変換する、ということはできないであろうか。

これは一見何でもないように思える。まず、二つの図形間の距離を何らかの方法(例えば対応する頂点の移動距離の二乗和)で測る。いくつかの規則図形候補を用意して、それぞれの規則図形で入力図形と最も距離が小さいものを生成し、その中で入力図形との距離が最も小さいものを選べばよさそうである。しかし、これには重大な問題が潜んでいる。

それは規則性に包含関係があることである。例えば正方形のクラスは長方形のクラスの部分集合である。このためどんな図形であれ、それに最も近い正方形との距離がそれと最も近い長方形との距離よりも小さくなることはあり得ない。一般に距離で判定する限り、どんな距離を用いても他の規則図形に包含される規則図形は決して選ばれない(図1)。

バタン認識では認識すべきクラスは分離していることが前提である。上述も問題のよく行われる解決法は包含関係を故意的に破壊し、クラスを分離することである。例えば隣り合う辺の長さの比が 1 から ϵ 以内の長方形は「長方形でない」と定義し、長方形のクラスと正方形のクラスを分離すればよい。しかし、包含関係は幾何学的規則性の本質であり、これを故意的に破壊すれば、さまざまな幾何学的推論に悪影響を及ぼす可能性がある。さらに、その分離のためのしきい値 ϵ はどう選べばよいのであるか。これを定める指導原理が見当たらない。

そこで包含関係を保存したまま判定を行なうことを考える。それには包含されるクラスがより好ましい(先の例では正方形のほうが長方形より好ましい)とい

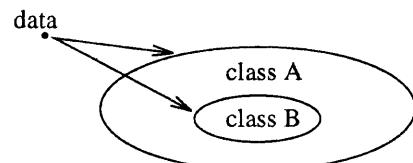


図1: 包含されるクラスは選ばれない。

う何らかの尺度が必要となる。そうすれば、その好ましさの尺度と距離によるずれの尺度のバランスで判定を行うことができる。

明らかに、データに誤差がなければ数学的な判定条件適用するだけである。問題は予測不可能な誤差があることである。したがって問題は「統計的推論」である。統計学において、この問題を解決する代表的な指導原理がAIC(情報量基準)である[1]。ただ、統計学では“データから分布の母数を推定する”という定式化をするので、その本質が理解しにくばかりか、それを幾何学的推定問題に適用することも難しい。それを幾何学的に解釈し直したもののが幾何学的AICである[2, 5]。

AICの指導原理はモデルの「予測能力」を考慮することである。例えば入力した四辺形 Q を正方形と判定し、それに最も近い正方形 \hat{S} を生成したとする。 \hat{S} に予測能力があるとは、 \hat{S} と異なる(未知)正方形 \bar{S} を変形した四辺形 Q' に対しても \hat{S} がよい近似を与えることをいう。同様に四辺形 Q に最も近い長方形 \hat{R} を生成したとすると、 \hat{R} の予測能力は \hat{R} とは異なる(未知)長方形 \bar{R} を変形した四辺形 Q'' に対しても \hat{R} がよい近似を与えるかどうかで測ることができる。

このように考えると、ずれの尺度が等しければ、正方形のほうが予測能力が高いことがわかる。なぜなら、長方形は正方形より自由度が多いので、同一のずれを許容する集合は長方形の場合のほうが正方形の場合より次元の高い多様体になり、正方形のほうが集合として狭く、したがって各要素を変形した四辺形に対して推定した \hat{S} がよい近似を与えるからである。

以上は直観的な説明であるが、以下ではこれを具体的に定式化し、何らのしきい値を用いることなく図形を自動的に識別する方式を示す。そして試作したシステムの実行例を示す。

2. 四辺形の規則性

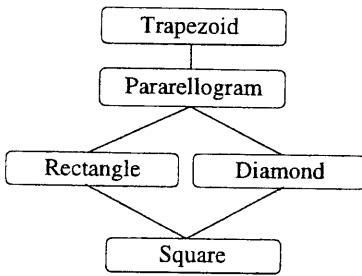


図 2: 四辺形のクラスの包含関係。

包含関係にある規則図形の例として台形、平行四辺形、菱形、長方形、正方形を考える(図 2)。これは例題に過ぎず、それ以外の規則図形でも以下の理論は同じである。

平面上の点 (x, y) を 3 次元ベクトル $\mathbf{x} = (x, y, 1)^\top$ で表し (\top は転置記号)、座標 (x, y) をもつ点を単に“点 \mathbf{x} ”などと書く。与えられた 4 点 x_1, x_2, x_3, x_4 をこの順に結ぶ四辺形が図 2 の規則図形である必要十分条件はそれぞれ次のように書ける。ただし $|\cdot, \cdot, \cdot|$ はベクトルのスカラ三重積であり、 (\cdot, \cdot) はベクトルの内積を表す。また $\mathbf{k} = (0, 0, 1)^\top$ と約束する。

[台形]¹

$$|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3, \mathbf{k}| \cdot |\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4, \mathbf{k}| = 0 \quad (1)$$

[平行四辺形]²

$$|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3, \mathbf{k}| = 0 \quad (2)$$

$$|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4, \mathbf{k}| = 0 \quad (3)$$

[長方形]³

$$|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3, \mathbf{k}| = 0 \quad (4)$$

$$|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4, \mathbf{k}| = 0 \quad (5)$$

$$(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) = 0 \quad (6)$$

[菱形]⁴

$$|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3, \mathbf{k}| = 0 \quad (7)$$

$$|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4, \mathbf{k}| = 0 \quad (8)$$

$$(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_2) = 0 \quad (9)$$

[正方形]

$$|\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_3, \mathbf{k}| = 0 \quad (10)$$

$$|\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_4, \mathbf{k}| = 0 \quad (11)$$

$$(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1) = 0 \quad (12)$$

$$(\mathbf{x}_3 - \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_4 - \mathbf{x}_2) = 0 \quad (13)$$

3. 図形の補正の一般論

任意に与えた N 点 $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ をそれと最も近いある規則図形に補正することを考える。その規則図形は次の L 個の方程式

$$F^{(k)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = 0, \quad k = 1, \dots, L \quad (14)$$

で指定されるとする。このときの“近さ”的度として補正のための各頂点の移動距離の二乗和を採用する。補正後の位置を $\hat{\mathbf{x}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N$ とし、次のように置く。

$$J = \sum_{\alpha=1}^N \|\mathbf{x}_\alpha - \hat{\mathbf{x}}_\alpha\|^2 \quad (15)$$

これは入力の誤差が期待値 0、分散一定の独立な正規分布に従うと仮定したときの対数尤度の符号を変えたものもある。その意味でこの補正は尤推定とも解釈できる。

入力データ $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ は式 (14) を満すとは限らない。補正量を $\Delta \mathbf{x}_1, \dots, \Delta \mathbf{x}_N$ とし、

$$\hat{\mathbf{x}}_\alpha = \mathbf{x}_\alpha - \Delta \mathbf{x}_\alpha \quad (16)$$

と置く。これを式 (14) に代入して、補正是小さいと仮定してテーラー展開し、1 次の項のみ残すと次のようにになる。

$$(\nabla_{\mathbf{x}_1} F^{(k)}, \Delta \mathbf{x}_1) + \dots + (\nabla_{\mathbf{x}_N} F^{(k)}, \Delta \mathbf{x}_N) = F^{(k)} \quad (17)$$

ただし $F^{(k)} = F^{(k)}(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N)$ であり、 $\nabla_{\mathbf{x}}(\cdot)$ は \mathbf{x} に関する勾配ベクトル $(\partial(\cdot)/\partial x_1, \dots, \partial(\cdot)/\partial x_N)^\top$ である。上式は未知数 $\Delta \mathbf{x}_1, \dots, \Delta \mathbf{x}_N$ に関する L 個の連立 1 次方程式であるが、その L 個の方程式が線形独立であるように式 (14) が与えられているとする。 L を式 (14) のランクと呼ぶ。

式 (17) の拘束条件のもとで式 (15) を最小にする解はラグランジュの未定乗数法により次のように求まる。

$$\Delta \mathbf{x}_1 \oplus \dots \oplus \Delta \mathbf{x}_N = \mathbf{A}^\top \mathbf{W} \mathbf{c} \quad (18)$$

¹式 (1) は向かい合う辺の一組が平行であることを表す。

²式 (2), (3) は向かい合う辺が共に平行であることを表す。

³式 (6) は隣り合う辺の一組が直交することを表す。

⁴式 (9) は対角線が直交することを表す。

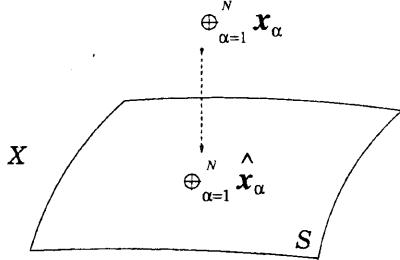


図 3: モデルへの直交射影。

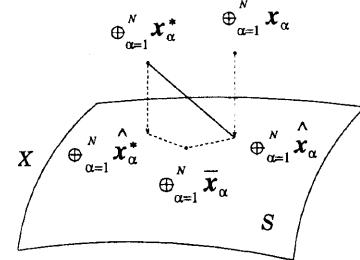


図 4: 幾何学的 AIC の導出。

ただし \oplus はベクトルの直和を表し、 \mathbf{A} , \mathbf{W} , \mathbf{c} はそれぞれ次のように定義する $L \times 3N$ 行列、 $L \times L$ 行列、 L 次元ベクトルである。

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \nabla_{\mathbf{x}_1} F^{(1)\top} & \dots & \nabla_{\mathbf{x}_N} F^{(1)\top} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ \nabla_{\mathbf{x}_1} F^{(L)\top} & \dots & \nabla_{\mathbf{x}_N} F^{(L)\top} \end{pmatrix} \quad (19)$$

$$\mathbf{W} = (\mathbf{A}\mathbf{A}^\top)^{-1} \quad (20)$$

$$\mathbf{c} = (F^{(1)}, \dots, F^{(L)})^\top \quad (21)$$

式 (18) は式 (14) の 1 次近似 (17) から得られたものであり、式 (14) が厳密に満足されるとは限らない。そこで $\hat{\mathbf{x}}_\alpha \leftarrow \mathbf{x}_\alpha - \Delta \mathbf{x}_\alpha$ として得られた $\hat{\mathbf{x}}_\alpha$ を改めてデータ \mathbf{x}_α とみなし、式 (14) が十分に満足されるまで反復する⁵。

4. 幾何学的 AIC

データ $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ は第 3 成分が 1 であるから $2N$ 自由度を持つ。これらの直和 $\bigoplus_{\alpha=1}^N \mathbf{x}_\alpha$ は $2N$ 次元空間 \mathcal{X} の一点として表せる。式 (14) はその空間中の $2N - L$ 次元の、すなわち余次元 L の多様体 S を定義する。式 (14) の定義する多様体をモデル S と呼ぶ。式 (15) を最小にする補正は、データをモデル S 上に最短距離で直交射影することを意味する [3] (図 3)。

式 (15) の $\hat{\mathbf{x}}_\alpha$ に最適な補正值を代入したものを \hat{j} と書き、残差平方和と呼ぶ。データ $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ は式 (14) を満すある N 点 (真の位置) $\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_N$ の各座標値に期待値 0、分散 σ^2 の独立な正規分布に従う誤差が加わったとする。 \hat{j}/σ^2 は第 1 近似において自由度 L の χ^2 分布に従う [5]。これは、残差平方和 \hat{j} に寄与するのが誤差の、モデル S の “ L 次元法線方向”

⁵これは本質的にニュートン反復であり、2 次収束するので 4, 5 回の反復で十分な精度が得られる。

の成分であるためである。したがって

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\hat{j}}{L} \quad (22)$$

が分散 σ^2 の不偏推定量である。

真の位置 $\bar{\mathbf{x}}_1, \dots, \bar{\mathbf{x}}_N$ に異なる誤差が加われば別のデータ (将来のデータ) $\mathbf{x}_1^*, \dots, \mathbf{x}_N^*$ が得られるはずである。このデータに関する残差平方和

$$J^* = \sum_{\alpha=1}^N \|\mathbf{x}_\alpha^* - \hat{\mathbf{x}}_\alpha\|^2 \quad (23)$$

の期待値

$$I = E^*[E[J^*]] \quad (24)$$

が小さいほど補正位置 $\hat{\mathbf{x}}_1, \dots, \hat{\mathbf{x}}_N$ の予測能力が高いと解釈できる。ただし $E^*[\cdot]$, $E[\cdot]$ はそれぞれ将来のデータ $\{\mathbf{x}_\alpha^*\}$, 現在のデータ $\{\mathbf{x}_\alpha\}$ に関する期待値を表す。式 (24) を期待残差と呼ぶ。その不偏推定量が第 1 近似において次のように与えられる [2, 5]。

$$AIC(S) = \hat{j} + 2(2N - L)\sigma^2 \quad (25)$$

これをモデル S の幾何学的情報量基準 (幾何学的 AIC) と呼ぶ [2, 5]。

式 (25) は次のように導出される (図 4)。 $2N$ 次元空間 \mathcal{X} の将来のデータ点 $\bigoplus_{\alpha=1}^N \mathbf{x}_\alpha^*$ のモデル S への直交射影を $\bigoplus_{\alpha=1}^N \hat{\mathbf{x}}_\alpha^*$ とする。式 (15), (23) の右辺をそれぞれ $L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2$, $L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2$ などと略記すると、

$$I = E^*[L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2] + E^*[E[L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2]] \quad (26)$$

となる。 $\{\mathbf{x}_\alpha^*\}$ と $\{\mathbf{x}_\alpha\}$ の統計的性質は等しいから、上式の右辺第 1 項は $E[\hat{j}]$ に等しい。真の値を $\{\bar{\mathbf{x}}_\alpha\}$ とすると、上式の右辺第 2 項は $E^*[L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2] + E[L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2]$ となる。モデル S の次元は $2N - L$ であり、この上で $\bigoplus_{\alpha=1}^N \hat{\mathbf{x}}_\alpha^*$ と $\bigoplus_{\alpha=1}^N \hat{\mathbf{x}}_\alpha$ は互いに独立であるから、 $L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2/\sigma^2$ と $L_{\hat{\mathbf{x}}\hat{\mathbf{x}}}^2/\sigma^2$ は第 1 近似において独立な自由

度 $2N - L$ の χ^2 分布に従い、その期待値はそれぞれ $2N - L$ である。これから式(25)が得られる。□

いま別のモデル S' を考え、そのランクを L' とする。このモデルに対する残差平方和を \hat{J}' とすると、その幾何学的 AIC は次のようになる。

$$AIC(S') = \hat{J}' + 2(2N - L')\sigma^2 \quad (27)$$

もし $AIC' < AIC$ であればモデル S' のほうがモデル S より予測能力が高いといえる。その条件は次のように書ける。

$$\hat{J}' - \hat{J} < 2(L' - L)\sigma^2 \quad (28)$$

5. 包含関係にあるモデルの選択

式(28)によってモデルを選択するには誤差の大きさを表す σ が既知でなければならない。誤差に関する知識が必要なことは直観的にも明らかである。なぜなら、例えば長方形か正方形かを判別しようとすると、誤差がほとんどなければ、わずかでも正方形と異なるものは正方形と判定できないが、誤差が非常に大きければどんな图形も正方形と判定して構わない(正方形かどうかを判定する意味がない)からである。

誤差に関する知識を得るには一般には別の情報(誤差の経験分布など)が必要である。しかし、モデルに包含関係があれば、それをを利用して誤差に関する知識を引き出すことができる。今、モデル S' を定義する L' 個の方程式がモデル S を定義する L 個の方程式に新たな方程式を追加したものと同値であるとする。このときモデル S' はモデル S より強い、あるいはモデル S はモデル S' より弱い、といい

$$S' \succ S \quad (29)$$

と書く。幾何学的には多様体 S' が多様体 S の部分多様体であることを意味する。このとき、弱いモデル S を仮定すれば、強いモデル S' が正しい正しくないにかかわらず誤差の分散 σ^2 が弱いモデル S の残差平方和から式(22)によって推定できる。これを式(28)に代入すると、判定条件が次のように書ける。

$$\frac{\hat{J}'}{J} < \frac{2L' - L}{L} \quad (30)$$

6. 規則四辺形の判別

入力した4点 x_1, x_2, x_3, x_4 を台形に最適に補正したときの残差平方和を \hat{J}_{trap} とする。同様に、平行四辺形、長方形、菱形、正方形に最適に補正したとき

の残差平方和をそれぞれ \hat{J}_{para} , \hat{J}_{rect} , \hat{J}_{diam} , \hat{J}_{squa} とする。判別の手順は次のようになる。

1. (a) 次の条件が満されれば平行四辺形と判定し、ステップ2に飛ぶ。

$$\hat{J}_{para} \leq 3\hat{J}_{trap} \quad (31)$$

- (b) 最適に補正した台形を出力して終了する。

2. (a) 次の条件が満されれば長方形と判定し、ステップ3に飛ぶ。

$$\hat{J}_{rectang} \leq 2\hat{J}_{para} \quad (32)$$

- (b) 次の条件が満されれば菱形と判定し、ステップ4に飛ぶ。

$$\hat{J}_{diam} \leq 2\hat{J}_{para} \quad (33)$$

- (c) 最適に補正した平行四辺形を出力して終了する。

3. (a) 次の条件が満されれば正方形と判定し、最適に補正した正方形を出力して終了する。

$$\hat{J}_{squa} \leq \frac{5}{3}\hat{J}_{rect} \quad (34)$$

- (b) 最適に補正した長方形を出力して終了する。

4. (a) 次の条件が満されれば正方形と判定し、最適に補正した正方形を出力して終了する。

$$\hat{J}_{squa} \leq \frac{5}{3}\hat{J}_{diam} \quad (35)$$

- (b) 最適に補正した菱形を出力して終了する。

注意すべきことは、判定のための何らの恣意的なしきい値 ϵ を必要としないことである。

7. 実験例

以上をワークステーション上にインストールして実験した例を示す。図5は台形と判定された例、図6は平行四辺形と判定された例、図7は長方形と判定された例、図8は菱形と判定された例、図9は正方形と判定された例である。それぞれ入力图形を細線で、補正图形を太線で示す。

8.まとめ

本論文では、マウスにより不規則な图形を入力するとのしきい値もなしに最も近い規則图形を判別し、

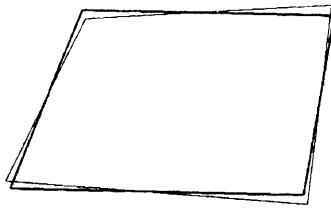


図 5: 台形と判定された例。

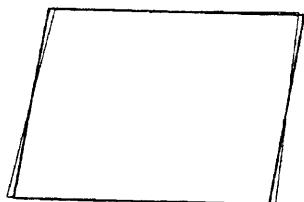


図 6: 平行四辺形と判定された例。

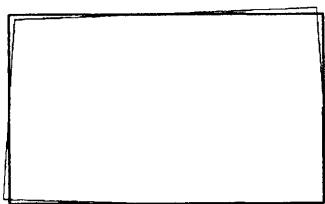


図 7: 長方形と判定された例。

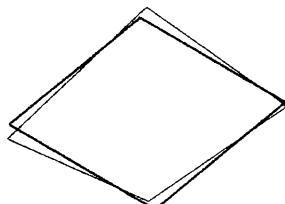


図 8: 菱形と判定された例。

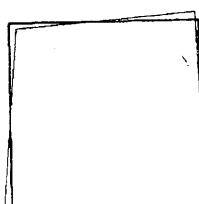


図 9: 正方形と判定された例。

それに自動的に変換するグラフィックインターフェースを実現した。まず、バタン認識とは異なり、判別する規則图形のクラスに包含関係にあることから、単に何らかの距離尺度で測って最も近いクラスを選択することができないことを示した。そして幾何学的情報量基準(AIC)によってこれが解決することを示すとともに、その原理の概略を述べ、システム実行例を示した。

包含関係にある特徴の認識、抽出、分類、識別はさまざまな応用が研究されているが[6, 8]、包含関係のもつ問題点はまだ意識されていないようである。ここに示した考え方はそのような多くの問題の解決に役立つと思われる。

参考文献

- [1] H. Akaike, A new look at the statistical identification, *IEEE Trans. Automation Control*, **19-6** (1974), 176–173.
- [2] 金谷健一, 幾何学的モデル選択の情報量基準, 電子情報通信学会技術研究報告, IT95-16 (1995), 19–24.
- [3] 金谷健一, 「空間データの数理—3次元コンピューティングに向けて—」, 朝倉書店, 1995.
- [4] 金谷健一, 幾何学的補正問題の最適計算と精度の理論限界, 情報処理学会論文誌, **3-3** (1996), 363–370.
- [5] K. Kanatani, *Statistical Optimization for Geometric Computation: Theory and Practice*, Elsevier Science, Amsterdam, 1996.
- [6] P. L. Rosin and G. A. West, Nonparametric segmentation of curves into various representations, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **17-12** (1995), 1140–1153.
- [7] 坂本慶行, 石黒真木夫, 北川源四郎, 「情報量統計学」, 共立出版, 1983.
- [8] H. Zabrodsky, S. Peleg and D. Avnir, Symmetry as a continuous feature, *IEEE Trans. Patt. Anal. Mach. Intell.*, **17-12** (1995), 1154–1166.