## カーネル SOM による損傷評価のための 隣接性を考慮した分類性能評価

#### 佐藤一永†3 井 健 —†1 赤 崎 省 悟†2 純一郎<sup>†3</sup> П 田 \_\_\_\_†1 水崎 正 行<sup>†1</sup> 1111 栗 原 沼尾

本稿では、き裂、摩擦や衝突音など損傷に関わる Acoustic Emission (AE) 信号に 対して、カーネル SOM のマップ上での隣接性を考慮した分類性能を評価した。AE 信 号の周波数スペクトルの分布間の距離として、確率分布間の距離に基づく Kullback-Leibler (KL) カーネルを用いた。また、SOM のマップ上での隣接性を考慮して、ク ラスタ純度や F 値による通常のクラスタリング尺度を拡張した。複数の模擬データ を用いて、いくつかの標準的なカーネルや通常 SOM と比較した結果、KL カーネル は F 値の観点で最も良い性能を示すことを確認した。また、可視化結果からも、KL カーネルは異なるクラスの分離性が良く、同じクラスが密集している様子を確認した。

### Perfomance of Kernel SOM considering Adjacency for Damage Evaluation

# Ken-ichi Fukui,<sup>†1</sup> Shogo Akasaki,<sup>†2</sup> Kazuhisa Sato,<sup>†3</sup> Junichiro Mizusaki,<sup>†3</sup> Koichi Moriyama,<sup>†1</sup> Satoshi Kurihara<sup>†1</sup> and Masayuki Numao <sup>†1</sup>

We evaluated clustering perfomance of Kernel SOM considering adjacency within the obtained map upon Acoustic Emission (AE) waves involved in damage such as crack, friction and collision. Here, we employed Kullback-Leibler (KL) kernel that is based on a distance between probability distributions as a distance between frequency spectrum distributions. Also standard clustering measures, e.g., cluster purity and F-measure, are extended so as to consider adjacency within the map obtained by SOM. Using simulated AE data sets, we confirmed the KL kernel performs the best among the several standard kernels in terms of F-measure. Moreover, the visualized map shows different classes can be well separated using KL kernel.

#### 1. はじめに

Kohonenによって提案された自己組織化マップ (Self-Organizing Map: SOM)<sup>1)</sup>は、デー タの特徴空間内での分布構造を縮約したマップを生成するため、大規模データの全貌の直 感的理解と利用者の探索的分析を助ける手法として工学を始め経済、医療など様々な分野 で診断や監視、データマイニングに応用されている。一般には、大規模データの教師なし の分析手法として、種々のクラスタリング法<sup>2)</sup>や、多次元尺度構成法(Multi-Dimensional Scaling: MDS)に代表される低次元への様々な埋め込み法<sup>3),4)</sup>が提案されている。クラス タリングと低次元への埋め込みの2段階行うことも考えられるが、我々はこれらを自然に 同時に行う方法として SOM に着目している。

我々は、固体型電池、特に固体酸化物燃料電池(Solid Oxide Fuel Cell: SOFC)の損傷 により生じる弾性波を計測した Acoustic Emission(AE)信号データから、損傷タイプや 損傷過程の分析や監視のための共通分析基盤として、SOM を応用することを想定している. SOM はデータの分布構造を汎化したモデルとしてマップを生成するため、過去の蓄積デー タベースから得られたマップと現在の信号系列から現在の状態を視覚的に把握したり、その 後どのような損傷過程を辿るのか予測を行ったりするのに適した手法と考えている.

ここで、AE法は広く建造物や部材の非破壊検査法として用いられている<sup>5)</sup>. AEの分野 では主として材料力学的な特性とAE信号との関係に関する研究であり、AE信号とクラ ス(損傷タイプ)を直接結びつけるパターン識別を扱った研究は数少ない.近年では、例 えば Rippengill らは、箱げた橋の損傷試験から得られたAEデータに対して、主成分分析 (PCA)の第一・第二主成分によって張られる平面でのデータの分布の可視化、および多層 ニューラルネットワークよる分類を行っている<sup>6)</sup>. また、Godin らは、ポリエステル複合材 の引張試験によって得られたAEデータに対して、k-meansとSOMを組み合わせてクラ スタリングおよび可視化を行っている<sup>7)</sup>. また、近年注目されている群知能の一種であるア ントコロニー最適化法(Ant Colony Optimizaion: ACO)を応用し、AE信号の模擬デー

†2 大阪大学大学院情報科学研究科

Graduate School of Information Science and Technology, Osaka University †3 東北大学多元物質科学研究所

Institute of Mulidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University

<sup>†1</sup> 大阪大学産業科学研究所

The Institute of Scientific and Industrial Research, Osaka University

タの分類<sup>8)</sup> もなされている. しかし, これらの研究において AE 波の類似度は, 周波数ス ペクトル, もしくは持続時間や分散など時間領域の特徴量の単純なユークリッド距離に基づ いており, AE 波の類似度として適切とは言い難い.

一方,近年,陰に高次元へ写像するカーネル関数を用いることで,線形の解析手法を非 線形手法に拡張したり,既存の手法に適切な類似度を組み込んだりすることを可能にする カーネル法が注目されている<sup>9)</sup>.カーネル法を利用した識別器としてサポートベクターマシ ン (Support Vector Machine: SVM)が有名であるが,SOM においてもカーネル化した カーネル SOM が提案されている<sup>10)-12)</sup>.ここで,カーネル法では対象の特性に合わせて適 切にカーネル関数を選択,もしくは設計することが重要となる.代表的なカーネル関数に は、多項式カーネル,ガウシアンカーネル、シグモイドカーネルなどがある.我々が応用を 想定している弾性波は、材料や破壊モードに固有の周波数を含むため、周波数スペクトルの 分布形状を考慮したカーネルを選択もしくは設計することが重要である.

それに対して本研究では、正規化周波数スペクトルにおいて、確率分布間の近さを測る Kullback-Leibler 情報量 (Kullback-Leibler divergence)を基にした KL カーネルに着目し た.石垣らは人工データにより KL カーネルを用いた SVM の分類性能を定量的に評価し ており、KL カーネルは他のいくつかの標準的なカーネルと比較して良好な性能を示してい る<sup>13)</sup>.しかし、現在のところ、AE 信号の周波数スペクトルに対するカーネル SOM の性能 評価はなされていない.

我々はこれまでに、実際の SOFC の損傷計測 AE データに対して、Sequence-based SOM による損傷過程の可視化<sup>14)</sup> や、KL カーネルを用いたカーネル SOM と通常の SOM の定 性的な比較<sup>15)</sup> を行ってきた.しかし、実際の SOFC において損傷タイプを制御した実験は 困難であり、また SOFC の分野において損傷メカニズムの大部分は現状では未知であるた め、定量的な評価は行えていない.そこで本稿では、一般に生じるき裂、摩擦や衝突音など 損傷に関わる AE 信号の模擬データを用いて、KL カーネルと標準的ないくつかのカーネル や通常 SOM との定量的な比較評価を行い、KL カーネルの AE 信号データに対する有効性 を確かめた.ここで、SOM の分類性能を定量的に評価するにあたって、クラスタ純度や F 値による通常のクラスタリング尺度は、クラスタ間の距離は考慮されていないため SOM の 評価尺度としては不十分である.そこで、SOM により得られたマップ上での近傍データの 隣接性を考慮するように評価尺度を拡張した.

#### 2. カーネル SOM

#### 2.1 カーネル法概説

形式的には、N 個の入力データ $\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N \in \mathcal{G}$ に対して、カーネル関数 $K: \mathcal{G} \times \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{R}$ は以下の性質を満たす関数である.

対称性  $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = K(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i).$ 

**半正定値性** 全入力データ  $\mathbf{x}_1, \cdots, \mathbf{x}_N$ , 任意の実数  $\alpha_1, \cdots, \alpha_N$  に対して次式が成り立つ.

$$\sum_{i} \sum_{j} \alpha_{i} \alpha_{j} K(\mathbf{x}_{i}, \mathbf{x}_{j}) \ge 0.$$
(1)

その場合,

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \langle \phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j) \rangle.$$
(2)

なる関数  $\phi: \mathcal{G} \to \mathcal{H}$  (再生核ヒルベルト空間と呼ばれる空間へ写像する関数) が存在する ことが示されている<sup>9)</sup>. ここで <,> は内積を表す. SOM をはじめとする学習手法の多く は、その学習過程ではデータ間の内積の形で現れるため、写像関数  $\phi$  の中身は陽に求まら なくとも、その内積さえ定義できれば良い. カーネル法はこの数学的性質を利用し、陰に高 次元へ写像した空間で学習を行う.

#### 2.2 Kullback-Leibler カーネル

v 個の離散点からなる周波数スペクトルを  $\mathbf{x}_i = (x_{i,1}, \cdots, x_{i,v})$ とすると, KL カーネル は次式で与えられる.

$$K_{\mathrm{KL}}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\beta \mathrm{JS}\left(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j\right)\right)$$
(3)  
$$\mathrm{JS}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \mathrm{KL}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) + \mathrm{KL}(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i)$$
$$= \sum_{k=1}^{v} \left\{ x_{i,k} \log \frac{x_{i,k}}{x_{j,k}} + x_{j,k} \log \frac{x_{j,k}}{x_{i,k}} \right\}.$$
(4)

ここで、KL( $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ )はKL情報量と呼ばれる確率分布間の近さを表す尺度であるが、KL情報量は非対称(すなわち、KL( $\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j$ )  $\neq$  KL( $\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i$ ))であるため、KL情報量を対称化したJensen-Shannon情報量を用いている。また、 $\beta$ (> 0)はスケーリングパラメータである。ただし、KL情報量は確率分布に対する量であるため、 $\sum_k x_{i,k} = 1$ に正規化する必要がある。周波数スペクトルを確率分布とみなすことは、スペクトルのパワー(絶対値)に依らず、周波数の相対的な出現確率分布を意味する。

注意点としては,式(3)は半正定値性を満たさないため,厳密にはカーネル関数ではな

い.しかしながら,圧力調整器の故障診断<sup>13)</sup>や,音声や画像分類<sup>16)</sup>などに用いられてお り,実用上役に立つ例が存在する.本稿においても同様に式(3)をカーネル関数とみなして 扱う.また,カーネル法を利用した代表である SVM においては,半正定値性を満たさない と大域的最適解が保障されなくなるが,本研究で用いるカーネル SOM においては学習過程 において半正定値性は要求されないため,重大な問題とはならない.

また、標準的なカーネル関数として本研究では次の3つのカーネルと比較した.

ガウシアンカーネル (GS)

$$K_{\rm GS}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \exp\left(-\frac{||\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j||^2}{2\sigma^2}\right).$$
 (5)

シグモイドカーネル(SG)

$$K_{\rm SG}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \tanh(a\mathbf{x}_i\mathbf{x}_j^{\rm t} - b). \tag{6}$$

多項式カーネル(PL)

$$K_{\rm PL}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = (\mathbf{x}_i \mathbf{x}_j^{\rm t} + l)^p.$$
(7)

ここで, $\sigma$ ,a,p(自然数)はパラメータである。本研究ではl = 0, b = 0に固定した.

2.3 カーネル SOM アルゴリズム

本節では、バッチ型カーネル SOM<sup>12)</sup> の概略を説明する. 一般の近傍関数  $h_{i,j}$  (i, j は ニューロンのノード番号)を用いたカーネル SOM の目的関数は次式で与えられる.

minimize 
$$L_{\text{ksom}} = \sum_{i=1}^{M} \sum_{\mathbf{x}_n \in C_i} \sum_{j=1}^{M} h_{i,j} ||\phi(\mathbf{x}_n) - \mathbf{m}_j||^2.$$
 (8)

ここで, *M* はニューロン数, *C<sub>i</sub>* は第*i*ニューロンが勝者(最近傍)となるデータ点の集 合, すなわち *C<sub>i</sub>* = {**x**<sub>n</sub>|*c*(*n*) = *i*} (*c*(*n*) は **x**<sub>n</sub> の勝者ニューロンの番号), また **m**<sub>j</sub> は第 *j*ニューロンに定義される参照ベクトルを表す. 近傍関数としては次式のガウス関数がよく 用いられる.

$$h_{i,j} = \exp\left(-\frac{||\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j||^2}{2\sigma^2}\right).$$
(9)

 $\mathbf{r}_i$ は第iニューロンの位置座標(通常 2 次元)であり、 $\sigma$ は近傍の影響力を表すパラメータ (近傍半径)である。ニューロンのトポロジーは通常 SOM と同じく、2 次元の場合は正方 もしくは六角格子を用いることができる。

通常のバッチ型 SOM<sup>1)</sup> の参照ベクトル更新式において  $\mathbf{x}_n$  を  $\phi(\mathbf{x}_n)$  置き換えると,カー ネル SOM において次式の関係が成り立つ.

$$\mathbf{m}_{i}(t+1) := \gamma \sum_{n} h_{c(n),i} \phi(\mathbf{x}_{n}).$$
(10)

ここで、tは更新ステップ数、 $\gamma$ は正規化項 $\gamma = 1/\sum_n h_{c(n),i}$ である。カーネル SOM で

は $\phi(\mathbf{x}_n)$ は求まらないため、参照ベクトル $\mathbf{m}_i$ とデータ点 $\mathbf{x}_n$ との非類似度 $d_{i,n}$ を更新することで、陰に参照ベクトルを更新する.

$$d_{i,n}(t+1) \equiv ||\phi(\mathbf{x}_n) - \mathbf{m}_i(t+1)||^2$$
  
=  $K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_n) - 2\gamma \sum_j h_{c(j),i} K(\mathbf{x}_n, \mathbf{x}_j)$   
+ $\gamma^2 \sum_k \sum_l h_{c(k),i} h_{c(l),i} K(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_l).$  (11)

以下にバッチ型カーネル SOM のアルゴリズムの概略を示す.

Step 1. ランダムに参照ベクトルとデータ点との非類似度 *d*<sub>*i*,*n*</sub> を与える.

Step 2. 勝者ニューロンを更新する.

$$\forall n \ c(n) = \arg\min d_{i,n}.$$
(12)

**Step 3.** 全ての参照ベクトルとデータ点との非類似度  $d_{i,n}$  を式 (11) により更新する. **Step 4.** 近傍半径  $\sigma$  を小さくし,収束するまで Step 2,3 を繰り返す.

#### 3. 隣接性を考慮した評価尺度

通常のクラスタリング尺度ではクラスタ間の関係は考慮されないため,SOMの性能尺度 としては十分ではないと考えられる.SOMは勝者ニューロンにより類似データ点の集合を 形成するが,それに加えてニューロンのトポロジーにより,データの分布構造を捉える特長 を持つ.そこで本稿では,通常のクラスタリング尺度を基にして,トポロジー上の近傍関数 を周辺化の重みとして利用することで隣接性を考慮するように評価尺度を拡張する.クラス タリング尺度としては大きく集合に基づく尺度<sup>17)</sup>と,データの対に基づく尺度<sup>18)</sup>があり, それぞれ拡張する.

まず,集合に基づく尺度としてクラスタ純度,クラス F 値<sup>\*1</sup>,エントロピーを考える.  $C_i \in C$  はクラスタ (SOM では勝者ニューロンによる類似データ点集合に相当),N は総 データ点数, $t \in T$  は (正解) クラス番号, $N_i$  は第 i クラスタのデータ点数, $N_t$  は第 t ク ラスのデータ点数, $N_{t,i}$  は第 i クラスタに含まれる第 t クラスのデータ点数を表すとする. ここで, $N_i$ , $N_{t,i}$ , N を近傍関数  $h_{i,j}$  により次式のように周辺化する.

<sup>\*1</sup> 単に F 値と呼ばれることが、多いがデータ対に基づく F 値と区別するためクラス F 値と呼ぶことにする.

**表1** ペアワイズ分割表 Table 1 Cross table for pairwise of data.

	$t(\mathbf{x}_i) = t(\mathbf{x}_j)$	$t(\mathbf{x}_i) \neq t(\mathbf{x}_j)$
$c(\mathbf{x}_i) = c(\mathbf{x}_j)$	а	b
$c(\mathbf{x}_i) \neq c(\mathbf{x}_j)$	с	d

$$N_i' = \sum_j h_{i,j} N_j. \tag{13}$$

$$N_{t,i}' = \sum_{i} h_{i,j} N_{t,j}.$$
 (14)

$$N' = \sum_{i}^{J} N'_{i}. \tag{15}$$

これらを用いてクラスタ純度、クラスF値、エントロピーは以下のように定義する.

クラスタ純度 (Cluster Purity: CP)

$$CP(C) = \frac{1}{N'} \sum_{C_i \in C} \max_{t \in T} N'_{t,i}.$$
(16)

クラス F 値 (Class F-measure: CF)

$$CF(C) = \sum_{t \in T} \frac{N_t}{N} \max_{C_i \in C} F(t, C_i),$$
(17)

$$F(t, C_i) = \frac{2 \cdot Prec(t, C_i) \cdot Rec(t, C_i)}{Prec(t, C_i) + Rec(t, C_i)}.$$
(18)

ここで、 $Prec(t, C_i) = N'_{t,i}/N'_i$ ,  $Rec(t, C_i) = N'_{t,i}/N'_t$ である. エントロピー (Entropy: EP)

$$EP(C) = \frac{1}{|C|} \sum_{C_i \in C} Entropy(C_i),$$
(19)

$$Entropy(C_{i}) = -\frac{1}{\log N'} \sum_{t \in T} \frac{N'_{t,i}}{N'_{i}} \log \frac{N'_{t,i}}{N'_{i}}.$$
(20)

次にデータ対に基づく尺度を考える上で、まず**表**1に示すペアワイズ分割表を拡張する. ここで、a, b, c, dはデータのペアが同じクラス (クラスタ) に属す(属さない)データ点数 である. SOM では、同じクラスタに属すデータ点数の代わりに、同じクラスタである尤度 likelihood( $c(\mathbf{x}_i) = c(\mathbf{x}_j)$ )を考え、ノード間距離に基づく近傍関数によって与える.

$$a' = \sum_{\{i,j|t(\mathbf{x}_i)=t(\mathbf{x}_j)\}} h_{c(\mathbf{x}_i),c(\mathbf{x}_j)}.$$
(21)

$$b' = \sum_{\{i,j|t(\mathbf{x}_i)\neq t(\mathbf{x}_i)\}} h_{c(\mathbf{x}_i),c(\mathbf{x}_j)}.$$
(22)

$$c' = \sum_{\{i,j|t(\mathbf{x}_i)=t(\mathbf{x}_j)\}} \left(1 - h_{c(\mathbf{x}_i),c(\mathbf{x}_j)}\right) = a + c - a'.$$
(23)

$$d' = \sum_{\{i,j|t(\mathbf{x}_i)\neq t(\mathbf{x}_j)\}} \left(1 - h_{c(\mathbf{x}_i),c(\mathbf{x}_j)}\right) = b + d - b'.$$
(24)

これら a', b', c', d' で与えられる拡張ペアワイズ分割表を用いて、ペアワイズ精度およびペ アワイズ F 値を次式により定義する.

ペアワイズ精度 (Pairwise Accuracy: PA)

$$PA(C) = \frac{a' + d'}{a' + b' + c' + d'}.$$
(25)

ペアワイズ F 値 (Pairwise F-measure: PF)

$$PF(C) = \frac{2 \cdot P \cdot R}{P + R}.$$
(26)

ここで, P = a'/(a'+b'), R = a'/(a'+c') である.

補足として,近傍関数が $h_{i,j} = \delta_{i,j}$  ( $\delta$ はクロネッカーのデルタ)の場合,上述の全ての 尺度は通常の尺度に一致するため自然な拡張である.また,近傍関数は $h_{i,j} \ge 0$ かつ距離 に関する単調減少関数になっている限り,隣接性を考慮した尺度になっていると言える.し かし,近傍半径を大きくとると全体を平滑化してしまうため,適度に小さくする必要があ る.本稿では近傍関数として式(9)を用い, $\sigma = 1$ とした.

#### 4. 分類性能評価

#### 4.1 模擬データ

ー般に破壊のモードには、き裂に代表される突発的な開口モードと、横ずれによる連続的 なせん断モードがある。開口モードはひずみ速度が速く、最初大きな振幅を持つ減衰波形が 得られる。一方、せん断モードはひずみ速度が遅く、振幅は小さいが持続した波形が得られ る<sup>5)</sup>.本研究では、AE 信号の模擬データとして、き裂や摩擦、衝突による音をコンクリー トマイクにより集音した。突発的な開口モードをき裂と衝突音によって、また連続的なせん





断モードを摩擦音によって模擬している.サンプリング周波数は 44.1kHz であるため,計 測可能な最大周波数は約 22kHz となる<sup>\*1</sup>.データセットは以下の 4 種類(大きくは 2 種類) を用意した<sup>\*2</sup>.

- データセット 1 図 1(a) に示すように木片の片端をペンチで固定し、他方の端に力を加え て割ったときに発生する音、また、図 1(b) に示すように割り箸の片方をペンチで固定 し割ったときの音を集音した。木片は4種類用意し、全5クラス、各クラス25サンプ ルづつ集音した。木片の種類と大きさは以下の通りである。
  - **クラス1** バルサ材 (小) 3mm×3mm×L=100mm
  - **クラス2** バルサ材 (大) 5mm×5mm×L=100mm
- \*1 本実験で用いるコンクリートマイクは可聴域しか集音できないため正しくは AE ではないが (AE は MHz オー ダーまで扱うが可聴域も含まれている), 信号として非可聴域と性質が異なるわけではない.
- \*2 これらのデータセットは, http://www.ai.sanken.osaka-u.ac.jp/~fukui/wave-data/ にて公開している.



図3 各クラスの平均周波数スペクトル Fig.3 Average frequency spectrum of each class.

- **クラス3** 竹串 2mm×3mm×L=180mm
- **クラス4** シナ材 3mm×3mm×L=100mm
- **クラス5** 割り箸 13mm×4mm×L=200mm

全5クラスを用いたデータセット 1a と, クラス 4, 5を除いた 3 クラスのデータセット 1b を用意した.

- データセット 2 図 2(a) に示すように厚紙でできた箱を斜面を滑らせたときに発生する摩擦音,および図 2(b) に示すよう箱を一定の高さから落としたときに発生する衝突音を 集音した。滑降させる速さや箱の大きさを変えて,以下の全5クラス,各クラス 25サ ンプルづつ集音した。
  - **クラス1** 摩擦音(低速) h=16cm, a=10cm, b=15cm, 重さ 21.0g
  - **クラス2** 摩擦音(中速)h=17cm, a=10cm, b=15cm, 重さ 21.0g
  - **クラス3** 摩擦音(高速) h=18cm, a=10cm, b=15cm, 重さ 21.0g
  - **クラス4** 衝突音(小)a=10cm, b=20cm, 重さ 25.5g
  - **クラス5** 衝突音 (大) a=20cm, b=30cm, 重さ 50.0g
  - データセット1と同じく、全5クラスを用いたデータセット 2a と、クラス 4、5 を除 いた摩擦音 3 クラスのデータセット 2b を用意した.

各サンプルは予め設定したしきい値を超えてからデータセット1では 32,768 点, データ セット2では 8,192 点記録し,周波数解析 (FFT) を行った.総和1に正規化後のクラス

			0			
	データセット 1a		データセット 1b			
カーネル/ノード数	$10 \times 10$	$12 \times 12$	$15 \times 15$	$10 \times 10$	$12 \times 12$	$15 \times 15$
KL	3.5	4.0	3.5	3.5	3.5	3.5
GS	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
$\operatorname{SG}$	140	140	140	170	170	170

**表 2** データセット 1 のパラメータ設定 Table 2 Parameter settings for dataset 1.

#### **表 3** データセット 2 のパラメータ設定 Table 3 Parameter settings for dataset 2.

	データセット 2a			データセット 2b		
カーネル/ノード数	$10 \times 10$	$12 \times 12$	$15 \times 15$	$10 \times 10$	$12 \times 12$	$15 \times 15$
KL	4.0	4.0	3.0	2.5	3.0	3.0
GS	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02	0.02
SG	130	130	90	70	50	30

毎の平均周波数スペクトルを図3に示す。図よりデータセット1はデータセット2に比べて、スペクトルのピークが近く目視では分類の難しいデータセットであることが分かる。

#### 4.2 評価結果

KL カーネル, ガウシアンカーネル, シグモイドカーネルのパラメータは, カーネル関数 値が全て0や1に偏っていない範囲で変化させ,初期値を変えた100回の平均F値が最も 良い値を採用した. このようにして決定した全てのパラメータの一覧を**表2,表3**に示す.

各データセットに対する性能評価結果を図 4~図 7 に示す. PL2, PL3 はそれぞれ 2 次, 3 次の多項式カーネル (p = 2,3)を表している. SOM のノード数が増加するに従ってクラ スタ純度は増加,それ以外の尺度は減少傾向にあるため、これらの尺度は異なるノード数間 で比較するものではないことに注意しておく.また、図中の★印は同ノード数の KL カーネ ルの評価値の分布との t 検定の結果、平均値に有意水準 5%で有意差が認められなかったこ とを示している.反対に★印の付いていない場合は、KL カーネルの平均値と有意差が認め られたことを示している.

まず, データセット 1a (図 4) については, 全尺度, 全ノード数において, KL カーネル は他のカーネルおよび SOM よりも良い性能を示している. ペアワイズ精度は僅かな差であ るが, それ以外の尺度については大きく他を上回っている. データセット 1b (図 5) では, クラスタ純度は KL カーネルはガウシアンカーネルよりは良いものの, その他のカーネル



図4 データセット 1a に対する性能評価比較 Fig.4 Comparison of performance evaluation on dataset 1a.

および SOM とほぼ同等かノード数によっては 15×15の場合は若干低い結果となった. エントロピーも同様の傾向にあるが、クラス F 値、ペアワイズ精度、ペアワイズ F 値については全てのノード数で KL カーネルが最も良い性能を示している.

データセット 2a (図 6) については, KL カーネルはエントロピーにおいてガウシアン カーネル以外のカーネルおよび SOM と同等か, ノード数 12×12 で若干高い(悪い)結果 となったが,その他の尺度については全ノード数において最も良い性能を示している.デー タセット 2b (図 7) では,クラスタ純度,エントロピーはガウシアンカーネルを除いた他 のカーネルと SOM より劣っているものの,クラス F 値,ペアワイズ精度,ペアワイズ F 値ついては全てのノード数で KL カーネルが最も良い結果となった.特に,クラス F 値お よびペアワイズ F 値はガウシアンカーネル以外のカーネルと SOM を大きく上回っている. まとめると,KL カーネルはクラスタ純度,エントロピーはデータセットによってはガウ シアンカーネル以外の他のカーネルおよび SOM とほぼ同等か,若干下回ることもあるが, クラス F 値,ペアワイズ F 値については,全てのデータセットで最も良





図5 データセット 1b に対する性能評価比較 Fig.5 Comparison of performance evaluation on dataset 1b.

#### い性能を示した.

#### 4.3 可視化結果

データセット 1a に対する可視化結果を図8 に示す. 図はノード数  $12 \times 12$  の場合のみ示 しているが、 $10 \times 10$ 、 $15 \times 15$  でも同様の傾向である. 格子点は SOM のノードを表して おり、また格子点上の数字はそのノードが勝者(最近傍)となるデータのクラスラベルの多 数決により、代表クラスを表示している. 数字が表示されていないノードは勝者となるデー タがなかったことを意味している.

下段の3次元マップのz軸方向は、SOMの表示法としてよく用いられるU-matrix<sup>19)</sup>の 考え方に基づく近傍ノードとの距離を反映した値となっている.すなわち、その値が高いほ ど特徴空間内で近傍ノードは分散(つまり周辺のデータも分散)しており、反対に値が低い ほど近傍ノードは密集(周辺のデータも密集)していることを示している.上段の2次元 マップはこれを上から見た図になっており濃淡と等高線で示されている.2次元マップでは 左上が(0,0)、右下が(11,11)に対応している.



図 6 データセット 2a に対する性能評価比較 Fig. 6 Comparison of performance evaluation on dataset 2a.

通常 SOM の U-matrix 表示では、ノードに定義されている参照ベクトル間のユークリッ ド距離を用いるが、カーネル SOM では参照ベクトルが陽に定義されない。そのため本稿 では、カーネル関数値に近傍関数を重みとして用いた次式によりノード *i*, *j* 間の距離 ND<sub>*i*, *j*</sub> を定義した。

ND<sub>*i*,*j*</sub> =  $\sum_{k} \sum_{l} 0.25(h_{i,c(\mathbf{x}_{k})} + h_{j,c(\mathbf{x}_{l})} + h_{i,c(\mathbf{x}_{l})} + h_{j,c(\mathbf{x}_{l})})K(\mathbf{x}_{k}, \mathbf{x}_{l}).$  (27) ここで,近傍関数は式 (9) を用いたが、クラスタリング尺度の拡張のときと同様に近傍半径  $\sigma$ を大きくすると全体を平滑化してしまう効果があるため、本稿では $\sigma = 1$ とした.

図 8) より, KL カーネルはガウシアンカーネル以外のカーネルや SOM に比べて, 代表 クラスが表示されているノード数が少ない. これは, 特徴空間内でのデータの分布に隔た りがあるためと考えられる.反対に, KL カーネルとガウシアンカーネル以外は, データ は特徴空間内で隔たりが少なく満遍なく分布をしているといえる.このことは, U-matrix のノード間距離にも現れており, KL カーネルは比較的起伏が大きく, その他のカーネルや



Fig. 7 Comparison of performance evaluation on dataset 2b.

SOM はなだらかな形状をしている その定量的な良さは 4.2 節で評価したところに依る

#### 5. おわりに

本稿では、損傷に関わる AE 信号の模擬データに対する Kullback-Leibler カーネルを用 いたカーネル SOM の性能評価を行った。複数の模擬データを用いて、一般に用いられてい るガウシアンカーネル、シグモイドカーネル、多項式カーネル、通常 SOM と比較して以下 の結果を得た。

- クラス F 値、ペアワイズ精度、ペアワイズ F 値の観点で KL カーネルは最も良い性能 を示した。特にクラス F 値、ペアワイズ F 値は他を大きく上回った。
- クラスタ純度およびエントロピーに関しては、ガウシアンカーネルを除く他のカーネル や SOM と同等もしくは若干劣る結果となった.
- U-matrix 表示による可視化の結果, KL カーネルはデータが隔たりを持って分布して いることが分かった.



図8 データセット 1a に対する可視化結果比較 Fig. 8 Comparison of visualized maps on dataset 1a.

以上より,損傷に関係する音データに対して KL カーネルは、比較した3つのカーネルや通 常 SOM よりも F 値に基づく観点で精度が良い可視化を行うことができると結論付けられ る。すわなち、異なるクラスの分離性が良く、同じクラスが密集した可視化ができる。しか しながら、実際に正解ラベルのないデータに適用する場合、パラメータ選択の課題が残る。 また、新たに定義した隣接性を考慮した SOM の評価尺度は、損傷に関係する音データに 限らず正解クラスラベルを持つデータセットであれば適用できる。

謝辞 本研究は文部科学省特別教育研究経費(新産業創造物質基盤技術研究センター),

#### 情報処理学会研究報告

IPSJ SIG Technical Report

関西エネルギー・リサイクル科学研究振興財団(2008R020),科学研究費補助金若手研究 (B)(21700165)の支援を受けて行われた。

#### 参考文献

- 1) Kohonen, T.: Self-Organizing Maps, Springer-Verlag, (1995).
- Jain, A.K., Murty, M.N. and Flynn, P.J.: Data Clustering: A Review, ACM Computing Surveys, Vol.31, No.3, pp.264-322, (1999).
- Tenenbaum, J.B., Silva, V. and Langford, J.C.: A Global Geometric Framework for Nonlinear Dimensionality Reduction, *Science*, Vol.290, pp.2319–2323, (2000).
- Roweis, S. and Saul, L: Nonlinear Dimensionality Reduction by Locally Linear Embedding, *Science*, Vol.290, pp.2323-2326, (2000).
- 5) 仲佐 博裕: アコースティックエミッションの理論と実際, 地人書館, (1994).
- Rippengill, S., Worden, K., Holford, K.M. and Pullin, R.: Automatic Classification of Acoustic Emission Patterns, *Journal for Experimental Mechanics: Strain*, Vol.39, No.1, pp.31–41, (2003).
- 7) Godin, N., Huguet, S. and Gaertner, R.: Influence of hydrolytic ageing on the acoustic emission signatures of damage mechanisms occurring during tensile tests on a polyester composite: Application of a Kohonen's map, *Composite Structures*, Vol.72, No.1, pp.79–85 (2006).
- Omkar, S.N. and Karanth U, R.: Rule Extraction for classification of acoustic emission signals using Ant Colony Optimisation, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, Vol.21, pp.1381–1388, (2008).
- 9) 赤穂 昭太郎: カーネル多変量解析, 岩波書籍, (2008).
- 井口 亮, 宮本 定明:カーネル関数を利用した LVQ クラスタリングと SOM, 日本 知能情報ファジィ学会誌, Vol.17, No.1, pp.88-94, (2005).
- Lau, K.W., Yin, H. and Hubbard, S.: Kernel Self-Organising Maps for Classification, *Neurocomputing*, Vol.69, pp.2033-2040, (2006).
- 12) Boulet, R., Jouve, B., Rossi, F. and Villa, N.: Batch Kernel SOM and Related Laplacian Methods for Social Network Analysis, *Neurocomputing*, Vol.71, pp.1257– 1273, (2008).
- 13) 石垣 司, 樋口 知之, 渡辺 嘉二郎: Kullback-Leibler カーネルによる正規化周波 数スペクトル判別とその圧力調整器劣化診断への応用, 電子情報通信学会論文誌 D, Vol.90, No.10, pp.2787–2797 (2007).
- 14) Fukui, K., Sato, K., Mizusaki, J., Saito, K. and Numao, M.: Combining Burst Extraction Method and Sequence-based SOM for Evaluation of Fracture Dynamics in Solid Oxide Fuel Cell, Proc. of 19th IEEE International Conference on Tools with Artificial Intelligence (ICTAI), pp.193–196, (2007).

- 15) 赤崎 省悟,福井 健一,佐藤 一永,水崎 純一郎,森山 甲一,栗原 聡,沼尾 正行:カーネル SOM を用いた波形信号のスペクトル形状を考慮したクラスタリング と可視化,第 21 回人工知能学会全国大会論文集, (2008).
- 16) Moreno, P.J., Ho, P.P. and Vasconcelos, N.: A Kullback-Leibler Divergence Based Kernel for SVM Classification in Multimedia Applications, Advances in Neural Information Processing Systems, Vol.16, pp.1385–1392 (2003).
- 17) Veenhuis, C. and Koppen, M.: Data Swarm Clustering, Swarm Intelligence in Data Mining, Eds. Abraham, A., Grosan, C. and Ramos, V, Springer-Verlag, Chapter 10, pp.221–241, (2006).
- 18) Xu, R. and Wunsch II, D.C.: CLUSTER VALIDITY, CLUSTERING, IEEE Press Series on Computational Intelligence, Chapter 10, pp.263–278, (2008).
- 19) Ultsch, A. and Siemon, H.P.: Self-Organizing Feature Maps for Exploratory Data Analysis, Proc. of the International Neural Network Conference (INNC), (1990).