2020年度＜若手研究_再公募＞共同利用研究報告書

2022年04月28日

所属・職名 長崎大学情報データ科学部・助教

加葉田 雄太朗

	整理番号	20200025		
1.研究計画題目	特異点論の視点からの異分野探訪			
2.新規・継続	新規			
3.種別	若手研究			
4.種目	短期研究員			
5.研究代表者	氏名	加葉田 雄太朗		
	所属部局名	長崎大学情報データ科学部	職名	助教
6.研究実施期間	2021年11月04日(木曜日)～2021年11月05日(金曜日)			
	2022年03月16日(水曜日)～2022年03月18日(金曜日)			
7.キーワード	特異点論、曲線曲面、因子分析、生体リズム、医療画像			
8.参加者人数	6人			

9.本研究で得られた成果の概要

関数や写像の特異点や特異性に着目することは自然科学や工学においてもよく行われる．例えば，画像処理における特徴点には，山尾根点のように，曲面の特異点に由来し実用上非常に有用なものがある。一方で非専門家にとっては関数や写像の特異性の扱いは容易ではなく，異分野でのそれらの解析は比較的簡単あるいは典型的なものに留まっている．さらに，たとえ数学の専門家が応用研究に取り組んでも，既存の枠組みを形式的に他分野に当てはめて満足しているケースも少なくない．本提案では特異点論の専門家である申請者が，九州大学に短期研究員として滞在し異分野の研究者たちと議論を行った．特に，異分野の研究者たちの問題意識を理解し，彼らが現場で直面している複雑な特異性の定式化の道筋をつけ，同時に，本格的な特異点論の実践にあたって既存の理論に不足している要素を明らかにすることを目的とした．結果として，特異点論および幾何学の新しい応用課題が具体的に発掘された．さらに交流した異分野の研究者たちに，比較的敷居が高いと言える最近の特異点論や幾何学の研究へのアクセスを提供することもできた．将来的な成果として，応用問題に刺激された新しい枠組みを特異点論にもたらすことも期待できる．

IMI若手研究報告書
「特異点論の視点からの異分野探訪」

∘ 加葉田　雄太朗　(長崎大学)

1　はじめに

関数や写像（あるいはそこから誘導される部分多様体の族）の特異点や特異性に着目することは自然科学や工学においてもよく行われる．例えば，画像処理における特徴点には，山尾根点のように，曲面の特異点に由来し実用上非常に有用なものがある．一方で，非専門家にとっては関数や写像の特異性の扱いは容易ではなく，異分野でのそれらの解析は比較的簡単あるいは典型的なものに留まっている．さらに，たとえ数学の専門家が応用研究に取り組んでも，既存の枠組みを形式的に他分野に当てはめて満足しているケースも少なくない．本提案では特異点論の専門家である申請者が，九州大学に短期研究員として滞在し異分野の研究者たちと議論を行った．特に，異分野の研究者たちの問題意識を理解し，彼らが現場で直面している複雑な特異性の定式化の道筋をつけ，同時に，本格的な特異点論の実践にあたって既存の理論に不足している要素を明らかにすることを目的とした．結果として，特異点論および幾何学の新しい応用課題が具体的に発掘された．将来的な成果として，応用問題に刺激された新しい枠組みを特異点論にもたらすことも期待できる．さらに，滞在中に交流する異分野の研究者たちに，比較的敷居が高いと言える最近の特異点論や幾何学の研究へのアクセスを提供することもできた．

本共同研究中に行った議論は下記の通りである．

- 廣瀬慧准教授（IMI）と「因子分析のある評価関数の最適解の特異点論的観点からの研究」
- 伊藤浩史准教授（芸術工学研究院）と「曲線族の微分幾何学的特異性という観点からの生物リズム現象の研究」
- 有村秀孝教授（医学研究院）及び有村研究室大学院生の二宮健太氏と「曲面族の特異性の観点からの医療画像解析の研究」
- 内田誠一教授（システム情報科学研究院）と「情報科学への特異点論の応用」

廣瀬氏との議論では因子分析で用いられる評価関数の最適解の研究に特異点論的な分岐の観点が重要であるという知見を得た．伊藤氏，有村氏，二宮氏らとの議論では，曲線や曲面の族の微分幾何学的研究が生物リズムや医療画像において，その特徴や特異性を理解する上で有用ではないかという知見を得た．内田氏との議論では情報科学に特異点論を応用するためのヒントを探るためにお互いの分野についての情報交換を行なった．下記では，特に廣瀬氏との議論を紹介する．

2　因子分析の研究

2.1　因子分析について

まず因子分析について簡単に説明する (cf. [1])．因子分析は多変量解析手法の一つであり，観測される変数の相関構造をより少数の観測されない潜在変数によって探索するための手法である．心理学，行動計量学，教育学，マーケ ティングなどの社会科学，生命科学，パターン認識などの自然科学への応用も多く試みられている．例えば，国語，数学，理科，社会，英語の 5 つの科目の試験の成績について考える. これらの科目間には相関があり，この科目間の相関構造を利用して観測変数よりも低い次元の因子で表現し，因子と観測変数の関係を見いだすのが因子分析モデルである．例えば，5 つの試験科目は「理系能力」と「文系能力」の 2 つの因子で表現出来ると考えられる．

因子分析モデルの推定は，正規性の仮定のもとで最尤法が用いられることが多いが，独自因子の分散，あるいは誤差分散の推定値が負となり，推定されたモデルの解釈に問題を残すことが古くから指摘されてきた．この問題は不適解問題と呼ばれ，van Driel (1978), Sato (1987), 狩野 (1998) などによって，理論的，数値的に広く研究されてきた. この不適解問題に関して特異点論や幾何学の立場から新しい知見を持たせないかということについて，廣瀬氏と議論を行った．

2.2　モデル

$\mathbf{X} = (\mathbf{X_1}, \cdots, \mathbf{X_p})^{\mathbf{T}}$ を p 次元観測変数ベクトル，$\mathbf{F} = (\mathbf{F_1}, \cdots, \mathbf{F_m})^{\mathbf{T}}$ を m 次元潜在変数ベクトル，$p \times m$ 行列 $\mathbf{\Lambda} = (\lambda_{\mathbf{ij}})$ を $p \times m$ 因子負荷行列，$\epsilon = (\epsilon_{\mathbf{1}}, \cdots, \epsilon_{\mathbf{p}})^{\mathbf{T}}$ を p 次元因子独自因子ベクトルと呼ぶ．上記に対して，

$$\mathbf{X} = \mathbf{\Lambda F} + \epsilon$$

が我々の考えるべきモデルとなる．前述の例では先ほどの 5 教科のテストデータの例では，観測される 5 教科の成績が $\mathbf{X}$ で，観測されない理系能力，文系能力が $\mathbf{F}$ である. 図 1

因子分析モデルでは，次のような仮定を置く．

$$E(\mathbf{F}) = \mathbf{0},\ \ \mathbf{E}(\epsilon) = \mathbf{0},\ \ \mathbf{E}(\epsilon \mathbf{F}^{\mathbf{T}}) = \mathbf{O},$$

$$E(\mathbf{F}\mathbf{F}^{\mathbf{T}}) = \mathbf{I_m}, \mathbf{E}(\epsilon\epsilon^{\mathbf{T}}) = \mathbf{\Psi}$$

ただし，$\mathbf{\Psi} = \mathbf{diag}(\psi_{\mathbf{1}}, \cdots, \psi_{\mathbf{p}})$ である．この仮定から $\mathbf{X}$ の平均構造と共分散構造：

$$E(\mathbf{X}) = \mathbf{0},\ \ \mathbf{Cov}(\mathbf{X}) = \mathbf{\Lambda\Lambda^T} + \mathbf{\Psi}$$

が得られる．

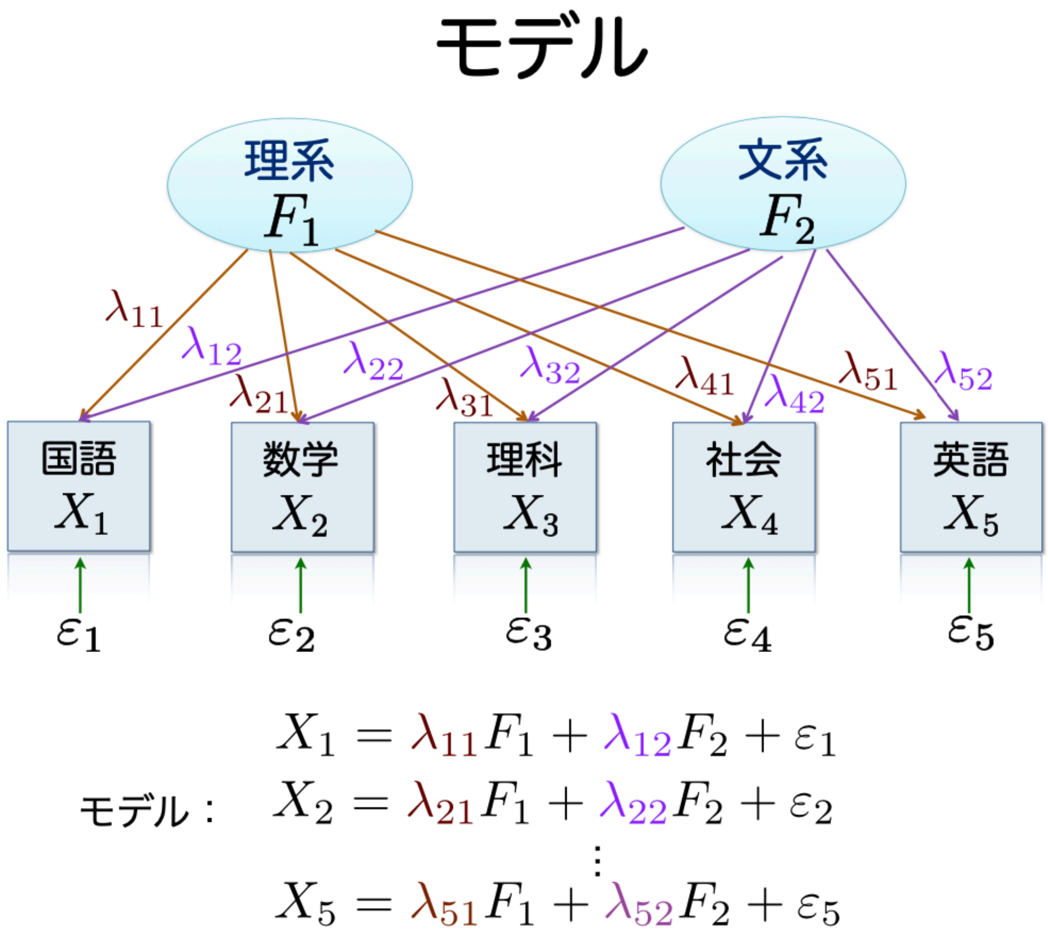

図 1: 因子分析の例（図は廣瀬氏より提供いただいた）

2.3　最尤法

上記の共分散構造

$$Cov(\mathbf{X}) = \mathbf{\Lambda}\mathbf{\Lambda}^{\mathbf{T}} + \mathbf{\Psi}$$

に加えて，

$$\mathbf{X} \sim \mathbf{N}(\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}) \tag{1}$$

を仮定する．この時，$\mathbf{x_1}, \cdots, \mathbf{x_n}$ が (1) に従って独立に発生するとすると，尤度関数は

$$\Pi_{i=1}^{n} f(\mathbf{x_i}|\mathbf{0}, \mathbf{\Sigma}) = \frac{\mathbf{1}}{(\mathbf{2}\pi)^{\mathbf{np/2}}|\mathbf{\Sigma}|^{\mathbf{n/2}}}\mathbf{exp}\left\{-\frac{\mathbf{1}}{\mathbf{2}}\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{n}}\mathbf{x_i}^{\mathbf{T}}\mathbf{\Sigma}^{-\mathbf{1}}\mathbf{x_i}\right\}$$

となる．さらに対数尤度関数をとると，

$$\ell(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Psi}) = -\frac{\mathbf{n}}{\mathbf{2}}\left(\mathbf{p}\log(\mathbf{2}\pi) + \log|\mathbf{\Sigma}| + \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{n}}\mathbf{\Sigma}_{\mathbf{i=1}}^{\mathbf{n}}\mathbf{x_i}^{\mathbf{T}}\mathbf{\Sigma}^{-\mathbf{1}}\mathbf{x_i}\right)$$

が得られる．以下の我々の議論では上記の式の代わりに，

$$H(\mathbf{\Lambda}, \mathbf{\Psi}) = \log|\mathbf{\Sigma}| - \mathbf{tr}(\mathbf{\Sigma}^{-\mathbf{1}}\mathbf{S})$$

という式を考えて良い．ただし，S は $p \times p$ 対称行列である．

上記の H の最適化問題を考えるのが目的であるが，下記の具体例に見るように H は非常に特殊な構造を持った関数である．冒頭に述べた不適解の性質やその構造を理解する上で，S によって H_S がどのように変形するかを研究することが非常に重要である．

2.4　具体例 1

最も簡単な場合として，$\Lambda = \lambda$, $\Psi = \psi$, $S = s$ の場合を考えよう．ここで，$\lambda, \psi, s \in \mathbb{R}$ である．この時，

$$\Sigma = \lambda^2 + \psi$$

であり，評価関数は

$$H_s(\lambda, \psi) = \log(\lambda^2 + \psi) - \frac{s}{\lambda^2 + \psi}$$

となる．すぐに，s の符号によって関数の性質が変わることに気がつく．特に，$s < 0$ の時のみに H_s は最小値を持つ．

この場合は非常に単純であり，因子分析の実用においては現れないような例であるが，このような例は S の性質によって解の性質が変化することを示唆している．

2.5　具体例 2

次に，

$$\mathbf{\Lambda} = (\lambda_{\mathbf{1}}, \lambda_{\mathbf{2}}),\ \ \mathbf{\Psi} = \psi(\in \mathbb{R}),\ \ \mathbf{S} = \mathbf{s}(\in \mathbb{R})$$

の場合を考える．この時

$$H_s(\lambda, \psi) = \log(\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \psi) - \frac{s}{\lambda_1^2 + \lambda_2^2 + \psi}$$

であり，具体例 1 と似た関数となり，これも s の符号によって関数の性質が変わる．

2.6 今後の研究について

我々はより一般の場合において，与えられた S によって H の極大極小点集合の構造がどのように変化するかを特異点論や幾何学の手法を用いて研究中である．特に，S の空間の割層分割が重要なテーマになる．割層分割は特異点論の文脈においてよく研究されてきており，特異点論の統計学への応用として有望な課題が見つかったといえる．また，計算機の専門家である深作助教 (九大数理) に協力を依頼して，計算機を用いた評価関数 $H(\lambda, \psi)$ の最適解の網羅的な決定法について今後議論を行う予定でもある．

参考文献

[1] 廣瀬慧，ベイズアプローチに基づく因子分析モデルの推定，修士論文，九州大学 (2010).