PCA 回帰による環境モデリングと状況に依存する特徴選択

本村 陽一 (電子技術総合研究所)† Nikos Vlassis†† Ben Krose(アムステルダム大学) ††

ロボットがセンサ入力から現在いる位置を認識する問題 (Robot localization) がある．本稿ではこの問題に対して確率的なモデル, PCA 回帰モデルを応用し, 経験的に得られたデータからの学習を行う．特にロボットの位置推定固有の学習の基準としてエントロピーにもとづく評価基準を提案し, PCA 回帰モデルがこの基準を最適化することを示し, KL ダイバージェンスや従来 S.Thrun により提案されている他の方法との違いについての議論を行う．さらにより良い場所推定を行うために状況に依存する特徴抽出を導入した局所的に複数の PCA 回帰モデルと組み合わせる手法について述べる．

Environment Modeling via PCA Regression and Situated Feature Focusing

Yoichi Motomura,† Nikos Vlassis†† and Ben Krose ††

Robot localization problem that is the task to recognize the current position of a robot from sensor inputs is studied. In this paper, we apply PCA regression models, and train the model from the data set obtained experimentaly. For learning stage, the criterion based on entropy is proposed, and we show that PCA regression model is justfied under this criterion. Comparison with Kullback Leibler divergence and S.Thrun's averaged Bayesian localization error are also discussed. Moreover, in order to realize better estimation, we propose situated feature focusing, and the method combining with local PCA regression models.

1. はじめに

実環境で知的なタスクを行うための自律移動ロボットにとって, 不確実な要因に満ちた実際の環境の中で自己の位置を同定することは本質的に重要なタスクである．完全に記述された環境のモデルとマッチングをとる方法ではしばしば起こるセンサのノイズや情報の欠損に対して頑健でないことや, 実際の環境を完全に記述することが容易でないなどの問題がある．実際の環境のこうした不確実性を取り扱うために確率的なアプローチが有効である [1)〜3),6),7)]．また, ロボットが環境を認識するのに十分な情報を得るためには多くのセンサや, カメライメージなどが必要とされ, 入力情報の次元は比較的大きくなるため, 内部的な取り扱いを容易にするために次元を下げることが行われる．これはパターン認識における特徴抽出に相当しロボットがセンサ情報から特徴 (ランドマーク) を抽出し, より次元の低いコンパクトな表現にすることで, 信号の冗長性の低減, 不要な信号変化に対する不変性などが期待できる．

そこでロボットの位置推定のための環境のモデル化として, まずセンサ信号からより低次元のベクトルへと写像し, これに対して場所を推定する確率モデルを考えることができる．これまでの研究では, 写像として線形の主成分分析 (PCA) を用いたもの [4)〜7)], 非線形写像であるニューラルネットを用いたもの [2),3)] や, ヒューリスティクスにもとづいて人間がデザインした特徴 (特定のマークや色など) を用いた例などがある．ただし, ニューラルネットの学習を用いたものでは学習に時間がかかったり, PCA は線形写像であるためモデルの自由度が少なく推定精度が不十分なことがあったり, ヒューリスティクスにもとづくものでは人的コストや, 環境固有の知識に強く依存するために汎用的でないなどの実際的な問題点がある．また特徴抽出の良さだけを直接評価することは容易ではなく, 本タスクにおいてどのような評価基準が数理的、計算論的に妥当であるかも明らかでない。

本研究ではこれらの問題に対して, ロボットの場所推定のために確率モデル, PCA 回帰モデルについて述べ, 計算論的に明確な基準, エントロピーにもとづく評価基準を導入し, PCA 回帰モデルがこの基準を最適化することを示す．さらに線形の PCA 回帰モデルを非線形領域へ拡張するために, 局所的な PCA 回帰モデルを結合した区分線形的なモデル化を提案する．この領域を区分する方法は特定の状況に依存して特徴を選択すること (Situated Feature Focusing) に対応し, 人間が環境を理解する際に自然に行っている能動

† 電子技術総合研究所 情報科学学部
Electrotechnical Laboratory, Information science division
†† アムステルダム大学 計算機科学部
The University of Amsterdam, Department of Computer science

的な知覚動作とも合致している．この方法により，従来のニューラルネットを用いる方法よりも高速に学習でき，また大域的に単一の PCA 回帰モデルを用いる場合よりも良い精度で場所推定を行うことができる．

2. 確率的モデリング

ロボットは環境中のある場所 x(例えば 2 次元ベクトル) において，複数のセンサから入力されるベクトル z を得るものとする．

さて，ロボットが場所を認識する問題はあるセンサ入力 z を得た時に正しい x を推定することである．このためにロボットは学習によって環境に関するモデル $x = M(z)$ を獲得することが必要である．しかし前章で述べたような環境の不確実性を扱うためにこれを条件付き確率分布 $P(x|z)$ によってモデル化する．この場合の x, z は確率変数 (ベクトル) である．この確率分布は $x = M(z)$ についての非決定的出力でもあり，確率値はセンサ入力を得た時のロボットが x にいる確信度として解釈することもできる．

ここで，実際問題として (i) 離れた場所から近いセンサ値が得られる可能性，(ii) 近い場所でもセンサ値が大きく変化する可能性の二点を考慮しなければならない．(i) から環境モデル M を z から x への一対一写像として表すことは適切でなく，また (ii) から非線形なモデルが必要なことがある．さらにセンサ値 z はノイズや冗長性を持つことが多いので，前処理として特徴抽出を行い，より次元の低い表現に変換する．この特徴抽出をある写像変換 f を用いて $y = f(z)$ と表す。さらに y と x の間の関係を確率的なものとすることでモデルを構成する．するとセンサ入力 z のもとでロボットの自己位置に関する事後確率は θ をパラメータとする条件付き確率分布 $P(y|x;\theta)$ とベイズの定理によって以下のように書ける．

$$P(x|z) = \frac{P(y = f(z)|x;\theta)P(x)}{\int_x P(y = f(z)|x;\theta)P(x)dx}. \qquad (1)$$

ここで $P(x)$ はロボットが位置する場所に関する事前確率分布で，分母の積分は全ての取り得る x に関する周辺化である．先に述べた (i) の理由から $P(x|y)$ は多峰性の分布である可能性があるが，式 (1) のようにモデル化することで，パラメトリックモデル $P(y|x;\theta)$ として単峰性の分布 (ガウス関数) を使うことができる．

したがって，環境のモデリングは

- 適切な特徴抽出 $y = f(z)$ の選択，
- パラメトリックモデル $P(y|x;\theta)$ の θ の推定

が必要で，これをロボットが経験的に獲得したデータセット $D \equiv \{x_i, z_i\}, (i = 1, \cdots)$ からの統計的学習で行う．

f, θ が決定すると，センサ情報 z を観測した時，

$$P(x|y) \propto P(y = f(z)|x;\theta)P(x). \qquad (2)$$

を最大にする x をロボットの現在位置の推定値として得ることができる．

3. PCA 回帰モデル

多次元のデータベクトルが多数与えられている時，できるだけ情報損失が少ない，より低次元の互いに無相関なベクトルに変換する手法が主成分分析 (Principal Component Analysis) として知られている．これは全てのベクトル z_i の分散共分散行列を Z とし，$Zw_j = \lambda_j w_j$ の固有値計算から得られた固有ベクトル w_j のうち固有値の大きい順に主要な成分を q 個だけ取り出して並べた行列 W によって，

$$y = f(z) = W^T Z = W^T(z - \bar{z}) \qquad (3)$$

という線形変換を構成するものである．これによる写像は互いに直交，無相関で変換後の分散を最大にするような線形結合となる．

次に主成分分析を行った後の y についてガウス関数を使ったパラメトリックモデル，

$$P(y|x;\theta) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} exp(-(g(x;\theta) - y)^2/2\sigma^2). (4)$$

を考える．ここで $g(x;\theta), \sigma^2$ はそれぞれ θ をパラメータとする非線形関数，ガウス関数の分散パラメータである． これらを定めた後で式 (1) におけるパラメトリックモデルの推定は θ を決定することである．g として例えば中心を固定した複数のガウスカーネルの線形結合とすると，その係数 θ は D に PCA を施した後のデータ $D_f \equiv \{x_i, y_i = f(z_i)\}$ による回帰 (最小二乗推定) でワンショットで求めることができる [6]．これを PCA 回帰モデルとよぶ．

4. ロボットの場所同定における評価基準

PCA 回帰モデルにおいて，f の決定は PCA の分散最大基準により行われ，θ は D_f についての回帰 (最小二乗基準) によって決定される．しかし，このように定められた基準の理論的妥当性は明らかではない．また一般的にロボットの場所同定問題のための特徴 f の選択と分布パラメータ θ の最適化がロボットの位置推定において持つ数理的，計算論的な意味も十分には議論されていない．本章ではロボットの位置推定問題におけるデータセットからの学習におけるエントロピーにもとづく評価基準を提案し，PCA 回帰モデルがこの基準の意味で最適であることを見る．

4.1 KL ダイバージェンスによる評価基準

データセットの発生源となる真の確率分布を仮定すると，これとロボットが場所の推定に用いるパラメトリックモデルとの分布間の距離，KL ダイバージェンス (Kullback-Leibler divergence) を推定の良さの基準として自然に導入することができる．そこで，真の確率分布を x, y 空間上で定義し，$P^*(x, y)$ とする．これに対して推定に用いるモデル，式 (4) による確率分布は $P(x, y) = P(y|x;\theta)P(x)$ であるから，この両者

の KL ダイバージェンスは, 次のように書ける.

$$\int_x \int_y P^*(x,y) \log \frac{P^*(x,y)}{P(y|x;\theta)P(x)} dydx$$
$$= \int_x \int_y P^*(x,y) \log P^*(x,y) dydx$$
$$- \int_x \int_y P^*(x,y) \log P(y|x;\theta)P(x) dydx. \quad (5)$$

第一項は D と $y = f(z)$ により決まる負のエントロピーになる. また第二項はモデルの D に関する対数尤度であり, これを $L_g(\theta)$ と書く.

4.2 エントロピーにもとづく評価基準

KL ダイバージェンス式 (5) の第一項の符号に注意すると, 第二項の尤度が等しい場合にはエントロピーが大きく, 確率分布の分散が大きいモデルをより良いとする基準になっている. これをロボットの位置推定に適用すると, データセット D からの近似が同程度であるとき, 確率モデルによる推定結果の確信度が低い方のモデルを選ぶ基準になる. つまりこの基準によって特徴抽出を選択すると, 写像後の分布 D_f のエントロピーがより大きく, 推定結果の曖昧性を高くしてしまう写像が選ばれてしまい不都合が生じる. そこで, ロボットの場所推定問題固有の性質を考慮した評価基準を考える.

推定結果の曖昧性はセンサ入力 z が写像 $y = f(z)$ を通して与えられた時の x の確率分布 $P(x|y = f(z))$ のエントロピー $H(x|y) \equiv -\int_x P(x|y = f(z)) log P(x|y = f(z))dx$, を全ての y について平均した $E_y[H(x|y)]$ で評価でき, これは次のように計算できる.

$$\int_y \int_x -P^*(x|y) log P^*(x|y) dx P^*(y) dy. \quad (6)$$

ただし,

$$P^*(y) \equiv \int_x P^*(x,y)dx \quad (7)$$
$$P^*(x|y) \equiv P^*(x,y)/P^*(y). \quad (8)$$

さらに $E_y[H(x|y)]$ は Bayes の定理から次のように展開できる.

$$E_y[H(x|y)] = E_y[H(y|x) + H(x) - H(y)]. (9)$$

$H(x)$ はデータセットにより決まるので、写像 $y = f(z)$ を選ぶことで操作できるのは, $H(y|x) - H(y)$ だけである. そこでこれを式 (5) の第一項の代わりに用いた,

$$E_y[H(y|x) - H(y)] - L_g(\theta) \quad (10)$$

をエントロピーにもとづく評価基準として提案する. これを小さくすることが良い場所推定を与える f の基準になる. 式 (10) を最小化する y は相互情報量,

$$I(x,y) = H(x) - H(x|y) = -(H(y|x) - H(y)) \quad (11)$$

を最大にする特徴抽出であるからこれは直観的にも妥当な基準になっている.

このエントロピーを実際に計算するときには写像後のデータからヒストグラムを得て計算する. またデータがパラメトリックモデルによって十分近似できる場合にはこれを解析的に求めることができる. そこで, PCA 回帰モデルの場合にこれを計算してみると, $H(y|x)$ は式 (4) から、分散 σ のみに依存する量となる (σ は回帰によって決まる定数). また, PCA により選ばれた m 番目の特徴 $y^{(m)}$ は分散を最大になるような順に選ばれているから $m < n$ においては $H(y^{(m)}) > H(y^{(n)})$ が成立している. したがって PCA 回帰モデルの特徴抽出は式 (10) の第一項を最小化することが言える.

次に第二項について見ると, 式 (10) の積分には, 未知の真の分布 $P^*(x,y)$ が必要となるので, その代わりに離散的に得られているデータセット D による総和から計算する. すると PCA 回帰モデルの場合の式 (10) の第二項は, 式 (4) を代入して次のようになる.

$$L_g(\theta) \propto \sum_i \log P(y = f(z_i)|x_i;\theta)$$
$$= \sum_i \log \frac{exp(-(g(x_i;\theta) - f(z_i))^2/2\sigma^2)}{\sigma\sqrt{2\pi}}$$
$$= \alpha - \beta \sum_i (g(x_i;\theta) - f(z_i))^2. \quad (12)$$

ただし, α, β は σ から定まる定数である.

したがって, これを最適化するための θ は二乗誤差 $\sum_i (g(x_i;\theta) - f(z_i))^2$ を最小化するように選べば良く, 最小二乗基準により決定した PCA 回帰モデルは式 (10) の第二項を最適化することが言える.

以上の結果から, PCA 回帰モデルは我々の提案するエントロピーにもとづく基準 (10) を最適化するものであることがわかる.

4.3 Averaged Bayesian localization error

S.Thrun[2] は次に説明する averaged Bayesian Localization Error とこれを最適化するようにニューラルネットを学習よることで得られる非線形な特徴選択法を提案している.

まずロボットが位置している真の場所を x^*, 推定場所を x とした時の推定誤差はノルム $||x - x^*||$ で評価できる. そこで, 真の x^* を一つ決めた時に確率モデル $P(x|y)$ の平均推定誤差を次のように表す.

$$Err(x^*) = \int_x \int_y ||x - x^*|| P(y|x^*) P(x|y) dx. (13)$$

ここで, $P(x|y)$ は入力が y であった時の推定場所 x の確率分布, $P(y|x^*)$ は真の場所 x^* のもとでの入力 y の尤度であり, 上式は全ての取り得る y の値について, 真の場所が x^* であった時の確率モデルの推定誤差の期待値を意味している. 先に述べたように, 確率モデルは $P(y|x)$ の形で定義されるので上式はベイズの定理を用いて

$$Err(x^*) = \int_x \int_y ||x - x^*|| P(y|x^*) \\ P(y|x)P(x)P^{-1}(y)dydx, \quad (14)$$

$$P^{-1}(x) = \int_x P(y|x)P(x)dx. \quad (15)$$

となる．さらにこれをロボットが存在し得る全ての真の場所 x^* の事前分布 $P(x^*)$ による期待値をとることで，最終的に

$$\begin{aligned} Err &= avg_{x^*} Err(x^*) \\ &= \int_x^* Err(x^*)P(x^*)dx^* \\ &= \int_{x^*} \int_x \int_y ||x^* - x|| P(y|x^*) \\ &\cdot\ P(y|x)P(x)P(x^*)P^{-1}(y)dydxdx^* \quad (16) \end{aligned}$$

が得られる．これが averaged Bayesian Localization Error である．文献[2]では y を真／偽二値のバイナリ変数に限定し，これをある種の非明示的なランドマークと考え，この基準を最適化するようにニューラルネットを最急降下的に学習することで自動的なランドマーク抽出と特徴選択を行っている．

この averaged Bayesian Localization Error の計算は x^*, x, y の三変数についての確率平均をとるため，計算量は $\mathcal{O}(|y||x|^2)$ になる．($|x|$ は x の確率空間のサイズ)．さらにニューラルネットの学習のために勾配の計算，学習回数を考慮しなければならないので，特徴選択に要する計算コストがかなり大きい。

一方，本稿で提案した評価基準式 (10) は x, y の 2 変数についての周辺化であるから，計算量は $\mathcal{O}(|y||x|)$ となりより低コストであり，PCA 回帰モデルのパラメータ決定は繰り返し的な計算を必要としないためより高速に実行できる．

5. Situated Feature Focusing

前章での PCA 回帰モデルの最適性の議論は大域的に線形な写像で D へのフッティングが可能な場合において，D から f と θ の決定法の妥当性を示したものである．しかし，先に述べた環境が持ちえる非線形性のため，線形写像にもとづく単一のモデルで十分なデータフッティングが行えるとは限らない．

この様なデータの非線形性に対処するために，部分的な領域において線形な局所的モデルを複数結合し，区分線形な写像を構成する方法を考える．ここで言う部分的な領域とは，x や z が特定の値をとる限定された領域のことである．したがって，直観的にはこの区分線形写像を用いる方法は限られた状況において異なる特徴量に注目すること，と解釈することができる．ロボットが環境から得るデータ D の非線形性が強い場合にこの Situated feature focusing を用いて適切に領域を限定することができれば，大域的に単一の PCA 回帰モデルよりも良い結果を得ることができる．またこれは人間が日常的に自然に行っているような，特定の状況によって起こりやすい仮説を念頭におき，それを立証するためにもっとも顕著な特徴に注意を向ける，といった行動ともよく合致している．

6. おわりに

本研究ではロボットの場所推定問題に関する確率的なモデル化とこの問題に特有のエントロピーにもとづく評価基準，PCA 回帰モデルとそれを非線形領域に拡張するための方法について述べた．

本稿で提案したこれらの方法により，これまでに提案されている方法よりも少ない計算コストで非線形な特徴抽出を実現できることが可能になる．ただし，非線形性を実現するために導入した Situated feature focusing において領域の分割をどのように行うかが重要な問題であり，これによって場所の推定結果も大きく影響する．この領域の分割を適切に行うための学習アルゴリズムの開発が今後の重要な課題である．

謝辞　有益な議論をいただいた，Roland Bunschoten, Bert Kappen, Wim Wiegerinck, David Barber の各氏に感謝する．また本研究は Real World Computing プログラムの一貫として行われた．

参考文献

1) T.Dean and M.Wellman: Planing and control, Morgan Kaufmann,CA (1991).
2) S.Thrun: Bayesian landmark learning for mobile robot localization, *Machine Learning*, 33(1) (1998).
3) S.Oore, G.E.Hinton and G.Dudek: A mobile robot that learns its place, *Neural Computation*, 9, pp.683-699 (1997).
4) S.Maeda, Y.Kuno and Y.Shirai: Active navigation vision based on eigenspace analysis, *proc. of Int.conf. on Intelligent Robots and Systems* (1997).
5) J.L.Crowley, F.Wallner, B.Schiele: Position estimation using principal components of range data, *the Proc. of int. conf. on Robotics and Automation* (1998).
6) N.Vlassis and B.Krose: Robot environment modeling via principal component regression, *proc. of Int.conf. on Intelligent Robots and Systems*(1999).
7) B.Krose and R.Bunschoten: Probabilistic localization by appearance models and active vision, *proc. of Int.conf. on Robotics and Automation* (1999).