一般化プロクラステス解析のSDP緩和解法における ランクリカバリー現象の解析

尾形　一穂

東京大学情報理工学系研究科数理情報学専攻（現：東日本旅客鉄道株式会社）
指導教員：岩田　覚　東京大学　教授

1.　一般化プロクラステス解析 (GPA)

形状分析における一般化プロクラステス解析 (GPA) とは端的にいえば，同一種類の物体の複数のサンプルから，それらの物体の真の形状を推定する問題である [1, 2]．対象とする物体には m 個の目印があり，真の形状の目印 l $(l = 1, \ldots, m)$ における座標を $\boldsymbol{r}_{0,l}$ とする．さらに同種類の物体のサンプルは n 個あり，各サンプルの m 個の目印の d 次元座標はすべて観測可能であるとする．加えて，物体 j $(j = 1, \ldots, n)$ の目印 l $(l = 1, \ldots, m)$ における観測座標 $\boldsymbol{r}_{j,l}$ は，真の回転に対応したある回転行列 $\hat{R}_j \in \mathrm{SO}(d)$ と，真の平行移動に対応したある d 次元の実ベクトル $\hat{\boldsymbol{t}}_j \in \mathbb{R}^d$ および各サンプルの各目印における誤差 $\boldsymbol{\delta}_{j,l} \in \mathbb{R}^d$ により，

$$\boldsymbol{r}_{j,l} = \hat{R}_j \boldsymbol{r}_{0,l} + \hat{\boldsymbol{t}}_j + \boldsymbol{\delta}_{j,l} \tag{1.1}$$

というモデルで記述できるものとする．全サンプルの各目印の座標 $\boldsymbol{r}_{j,l}$ がすべて得られたときに, 真の形状における各目印の座標 $\boldsymbol{r}_{0,l}$ を推定することを考える．観測座標 $\boldsymbol{r}_{j,l}$ を用いて，行列 $A_j \in \mathbb{R}^{d\times m} (j = 1, \ldots, n)$ を $A_j = [\boldsymbol{r}_{j,1}, \ldots, \boldsymbol{r}_{j,m}]$ で定義する．同様に真の形状の各目印の座標 $\boldsymbol{r}_{0,l}$ の推定量 $\boldsymbol{h}_l$ を用いて, 行列 $H \in \mathbb{R}^{d\times m}$ を $H = [\boldsymbol{h}_1, \ldots, \boldsymbol{h}_m]$ で定義する．このとき，次の問題

$$\begin{aligned} \min \quad & \sum_{j=1}^{n} \| R_j A_j + \boldsymbol{t}_j \mathbf{1}_m^\top - H \|_{\mathrm{F}}^2 \\ \text{s.t.} \quad & H \in \mathbb{R}^{d\times m}, R_j \in \mathrm{SO}(d),\ \boldsymbol{t}_j \in \mathbb{R}^d \end{aligned} \tag{1.2}$$

の最適解 H によって真の形状における目印の位置関係を推定するのが GPA である．ただし $\mathbf{1}_m \in \mathbb{R}^m$ は全成分が 1 の m 次元ベクトルとする．この GPA はコンピュータービジョンや形態測定学などの分野における形状分析に応用されている．本研究では次元 d を 2 以上で固定した際，問題 (1.2) が NP 困難であることを示した．

2.　2 次元 GPA のランクリカバリー現象

問題 (1.2) の次元が $d = 2$ のときにおいて，2 次元特殊直交群と 1 次元ユニタリー群の同型性を利用して，元問題を複素空間上の最適化問題として定式化する．問題 (1.2) の入力の行列 $A_j \in \mathbb{R}^{2\times m}$ を用いて，$B_j = A_j L_m$ としたとき m 次元複素ベクトル $\boldsymbol{\gamma}_j \in \mathbb{C}^m$ を $\boldsymbol{\gamma}_j =$（行列 B_jの 1 行目$)^\top + \mathrm{i}$（行列 B_jの 2 行目$)^\top$ で定める．ただし i は虚数単位を表し，行列 L_m は $L_m = I_m - \frac{1}{m}\mathbf{1}_m\mathbf{1}_m^\top$ で定義する．さらにこのベクトル $\boldsymbol{\gamma}_j \in \mathbb{C}^m$ を用いて，半正定値エルミート行列 $C_{\mathrm{H}} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ の (j, k) 成分を $(C_{\mathrm{H}})_{j,k} = \boldsymbol{\gamma}_j^* \boldsymbol{\gamma}_k$ で定めると，この行列 C_{H} を入力とする次の問題を解くことは元の問題 (1.2) を解くことと等価である：

$$\begin{aligned} \min \quad & -\frac{1}{n}\boldsymbol{x}^* C_{\mathrm{H}} \boldsymbol{x} + \mathrm{Tr}\ C_{\mathrm{H}} \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n,\ |x_1| = |x_2| = \cdots = |x_n| = 1. \end{aligned} \tag{2.1}$$

この問題 (2.1) の最適解が得られれば，元の問題 (1.2) の最適解を容易に構成することができる．しかし，入力 C_{H} が一般の半正定値エルミート行列であるような場合，問題 (2.1) は NP 困難であること [3] がすでに知られており，これを直接効率的に解くことは容易ではない．一方で次のような SDP 緩和を用いた乱択近似アルゴリズム [4] は既に提案されている：

$$\begin{aligned} \max \quad & \mathrm{Tr}(C_{\mathrm{H}} X) \\ \text{s.t.} \quad & X \in \mathbb{C}^{n\times n}, X \succeq O, \\ & X_{i,i} = 1 \ \ (i = 1, \ldots, n). \end{aligned} \tag{2.2}$$

Angular synchronization 問題における同様の SDP 緩和の考察 [5] をもとに，本研究では 2 次元 GPA の SDP 緩和問題 (2.2) について次の定理を導いた．

定理 1.　観測座標 $\boldsymbol{r}_{j,l}$ がモデル (1.1) に従っていて（ただし真の形状の m 個の目印の座標 $\boldsymbol{r}_{0,1}, \ldots, \boldsymbol{r}_{0,m}$ がすべて一致することはないものとする），さらにある正の数 $\xi > 0$ が存在してすべての $\boldsymbol{\delta}_{j,l} (1 \le j \le n, 1 \le l \le m)$ について，$\|\boldsymbol{\delta}_{j,l}\| \le \xi$ を満たすとする．この ξ が不等式

$$\frac{(2\sqrt{\alpha m}\ \sigma + m\sigma^2)^2}{\alpha^2} + \frac{2(\sqrt{\alpha m} + \beta m)\sigma + 3m\sigma^2}{24\alpha} \le \frac{1}{24}$$

を満たすならば，緩和問題 (2.2) の最適解 X のラン

クは 1 に等しく，ベクトル $\boldsymbol{x} \in \mathbb{C}^n$ が $X = \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^*$ を満たすならば，$\boldsymbol{x}$ は問題 (2.1) の最適解となる．ただし，不等式中におけるパラメータ α, β は真の形状における m 個の目印の座標 $\boldsymbol{r}_{0,1}, \ldots, \boldsymbol{r}_{0,m}$ とその重心 $\boldsymbol{r}_{\mathrm{G}} = \frac{1}{m}\sum_{l=1}^{m} \boldsymbol{r}_{0,l}$ を用いて，以下のように定義する：

$$\alpha = \sum_{l=1}^{m} \|\boldsymbol{r}_{0,l} - \boldsymbol{r}_{\mathrm{G}}\|^2, \beta = \max_{1 \le l \le m} \|\boldsymbol{r}_{0,l} - \boldsymbol{r}_{\mathrm{G}}\|.$$

この定理 1 は観測時の誤差 $\boldsymbol{\delta}_{j,l}$ の大きさが十分に小さい場合は SDP 緩和解法によって 2 次元 GPA の厳密解が求まることを意味している．本稿ではこのような現象をランクリカバリー現象と呼ぶ．

3. 一般次元 GPA のランクリカバリー現象

一般次元 GPA について，問題 (1.2) の回転制約を直交制約に緩和した問題が次の問題である：

$$\begin{array}{ll} \max & -\dfrac{1}{n}\mathrm{Tr}\big(Z^\top C Z\big) + \mathrm{Tr}\, C \\ \text{s.t.} & Z = [Z_1^\top, \ldots, Z_n^\top]^\top,\ Z_i \in \mathrm{O}(d). \end{array} \tag{3.1}$$

なお，問題 (3.1) の入力 $C \in \mathbb{R}^{nd \times nd}$ は

$$C = [B_1^\top, \ldots, B_n^\top]^\top [B_1, \ldots, B_n] \tag{3.2}$$

とする（ただし $B_j = A_j L_m$）．ここで $N = nd$ とおくと，この問題 (3.1) を [6, 7] と同様の形式で SDP 緩和した問題が以下のものである：

$$\begin{array}{ll} \max & \mathrm{Tr}(CY) \\ \text{s.t.} & Y \in \mathbb{R}^{N \times N}, Y \succeq O, \\ & Y_{i,i} = I_d \ (i = 1, \ldots, n). \end{array} \tag{3.3}$$

ただし制約式 $Y_{i,i} = I_d$ はサイズが $d \times d$ の行列 Y における n 個全ての対角ブロックが単位行列であることを意味している．このとき以下の定理が成り立つ．

定理 2. 真の形状の m 個の目印の座標 $\boldsymbol{r}_{0,1}, \ldots, \boldsymbol{r}_{0,m}$ が d 次元空間中の同一の超平面上には存在しないものとし，またその m 個の目印の重心は座標原点にあると仮定する．観測座標 $\boldsymbol{r}_{j,l}$ がモデル (1.1) に従っていて，すべての $\boldsymbol{\delta}_{j,l} (1 \le j \le n, 1 \le l \le m)$ について，

$$\|\boldsymbol{\delta}_{j,l}\| \le \frac{\sigma_1(A_0)}{\sqrt{m}} \left(-1 + \sqrt{1 + f(\kappa, d)}\right) \tag{3.4}$$

を満たすならば，緩和問題 (3.3) の最適解 Y のランクは d に等しく，行列 $Z \in \mathbb{R}^{nd \times d}$ が $Y = ZZ^\top$ を満たすならば，Z は問題 (3.1) の最適解であり，加えてその最適解 $Z = [Z_1^\top, \ldots, Z_n^\top]^\top$ $(Z_i \in \mathrm{O}(d))$ について $\det Z_1 = \cdots = \det Z_n$ が成り立つ．ただし，$\sigma_k(A_0)$ は真の形状における m 個の目印の座標で定義された行列 $A_0 = [\boldsymbol{r}_{0,1}, \ldots, \boldsymbol{r}_{0,m}] \in \mathbb{R}^{d \times m}$ の k 番目に大きな特異値とし，さらに不等式 (3.4) における $f(\kappa, d)$ は，$\kappa = \left(\frac{\sigma_1(A_0)}{\sigma_d(A_0)}\right)^2$ で定義した κ や $h(\kappa, d) = 4\sqrt{d}\,\kappa^2 + (2\sqrt{d} + 1)\kappa + 1$ を用いて，

$$f(\kappa, d) = \frac{-h(\kappa, d) + \sqrt{(h(\kappa, d))^2 + 16\kappa d}}{16\kappa^2 d} \tag{3.5}$$

で定めたパラメータとする．

問題 (3.1) の最適解 Z に右から任意の d 次直交行列をかけて構成される行列も同じく最適解であることから，観測時の誤差 $\boldsymbol{\delta}_{j,l}$ の大きさが十分に小さい場合には SDP 緩和問題 (3.3) を解くことで問題 (3.1) の最適解の中でも $Z_i \in \mathrm{SO}(d)$ となる解が得られ，そこから元問題 (1.2) の最適解を構成できることをこの定理 2 は意味している．以上のように一般次元の GPA についても同様のランクリカバリー現象が確認できた．

4. まとめ

本論文では効率的に最適解を求めるのが困難とみられる一般化プロクラステス解析について，観測時の誤差の大きさが十分に小さい場合には SDP 緩和問題を解くことで厳密解が得られるメカニズムを考察した．最適解を求めるのに許容可能な誤差の大きさの，より精密な評価が今後の課題といえる．

参考文献

[1] C. R. Goodall, “Procrustes methods in the statistical analysis of shape,” *Journal of the Royal Statistical Society, Series B*, **53**, pp. 285–339, 1991.

[2] I. Dryden and K. Mardia, *Statistical Shape Analysis*, Wiley, 1998.

[3] S. Zhang and Y. Huang, “Complex quadratic optimization and semidenite programming,” *SIAM Journal on Optimization*, **16**, pp. 871–890, 2006.

[4] A. Ben-Tal, A. Nemirovski and C. Roos, “Extended matrix cube theorems with applications to μ-theory in control,” *Mathematics of Operations Research*, **28**, pp. 497–523, 2003.

[5] A. S. Bandeira, N. Boumal and A. Singer, “Tightness of the maximum likelihood semidefinite relaxation for angular synchronization,” *Mathematical Programming*, **163**, pp. 145–167, 2017.

[6] K. N. Chaudhury, Y. Khoo and A. Singer, “Global registration of multiple point clouds using semidefinite programming,” *SIAM Journal Optimization*, **25**, pp. 468–501, 2015.

[7] A. S. Bandeira, C. Kennedy and A. Singer, “Approximating the little Grothendieck problem over the orthogonal and unitary groups,” *Mathematical Programming*, **160**, pp. 433–475, 2016.