

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

Clustering and Visualization of Waveform Signals Reflecting Spectrum Shape using Kernel-SOM

赤崎 省悟*1
Shogo Akasaki

福井 健一*2
Ken-ichi Fukui

佐藤 一永*3
Kazuhisa Sato

水崎 純一郎*3
Junichiro Mizusaki

森山 甲一*2
Koichi Moriyama

栗原 聡*2
Satoshi Kurihara

沼尾 正行*2
Masayuki Numao

*1大阪大学大学院情報科学研究科

Graduate School of Information Science and Technology, Osaka Univ.

*2大阪大学産業科学研究所

The Institute of Scientific Industrial Research, Osaka Univ.

*3東北大学多元物質科学研究所

Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials Tohoku Univ.

Waveform signals are obtained as data of sound, earthquake, and so on. Because the scale of such data is large, the technique of Data Mining is effective. Especially, clustering and visualization are used to capture the entire picture of large scale data. Recently, Self-Organizing Map(SOM) is used for clustering of spectrum data, but it couldn't reflect the spectrum shape because it used Euclid distance for similarity evaluation. In this paper, we used Kernel-SOM for the spectrum data and found that Kernel-SOM using Kullback-Leibler(KL) kernel enables clustering and visualization of waveform signals reflecting spectrum shape. We used destruction evaluation test data of Solid Oxide Fuel Cell(SOFC) for the experiment.

1. はじめに

近年、計測技術や機器の発達により、様々な信号をデータとして扱う機会が増えてきている。中でも波形信号は最も一般的な信号であり、音声データや地震データなどは波形信号として得られる。このようなデータを解析する際、サンプリング周期や計測時間、データのサンプル数などに左右されるものの、扱う情報量はかなり大きいものとなる。これらを自動的に解析する手法として、大量のデータの中から有用な情報を取り出す技術として発達してきたデータマイニングの手法を応用する研究が行われており [1]、その中でも、このような大規模なデータにおいてはクラスタリング及び可視化を行うことがデータ全体の概要をつかむのに有効であると考えられている。波形信号の解析方法としてはその信号の持つ周波数的特徴を利用したものが主であるが、クラスタリングを行う際のスペクトルデータの類似度評価については、各データ間のユークリッド距離を用いたものが一般的であった。クラスタリング手法の中では、ニューラルネットワークの教師なし学習の一つである自己組織化マップ(SOM)[2]がクラスタリングと可視化を同時に行うことができる手法であり、先行研究 [3] において、SOMによって波形信号のスペクトルデータが大局的に評価可能であることが示された。しかし、ユークリッド距離におけるスペクトル間の類似度評価方法は、スペクトルそのものの形状を考慮しているとは言えないものであった。

本論文では、スペクトルデータの形状を考慮したクラスタリング及び可視化のために、非線形データの解析に用いられるカーネル法という手法を SOM に応用したカーネル SOM[4] を用いた。カーネル法とは後述するように非線形なデータを高次

元空間に写像することにより間接的に線形空間での手法を適用できるようにする方法であり、カーネル関数という関数を用いることによりその計算量を大幅に減少させている。本論文ではスペクトル間の類似度を測るカーネル関数として用いられている Kullback-Leibler(KL) カーネル [5] を使用した。実験においてはアコースティック・エミッション (AE) 法を用いた固体酸化燃料電池 (SOFC) の損傷評価試験の計測データを用い、写像後の空間におけるデータのクラスタリングをカーネル SOM によって行った後、従来の SOM と比べてスペクトルの形状を考慮したクラスタリングができていたことを確認した。本論文における新規性はスペクトルデータのクラスタリングにカーネル SOM を使用したこと及びカーネル SOM におけるカーネル関数に KL カーネルを使用したことである。

2. カーネル法

2.1 カーネル法とその性質

カーネル法は非線形なデータの解析に用いられる手法であり、具体的には、非線形データの集合に対して無限次元を含む高次元への非線形写像を行い、その空間内で線形空間の手法を用いることで非線形データ手法への拡張をすることができるものである。ただし写像 ϕ の次元が高いため、そのまま計算を行うと計算量が膨大になる。そこで線形手法の本質である内積計算を考える。

高次元における線形手法において、実際に計算されるのは相関行列や分散共分散行列といったものであり、それらの式の中で x, y の写像 $\phi(x), \phi(y)$ は単独で式の中に現れることはなく、全てが内積の形で現れる。つまり、写像の形が分からなくても、写像前のデータ x, y を与えれば写像後の空間における内積「だけ」を計算できる関数 (カーネル関数) が分かれば、その高い次

連絡先: 赤崎省悟, 大阪大学大学院情報科学研究科情報数理学専攻, akasaki@ai.sanken.osaka-u.ac.jp

元における計算が間接的に可能になる。
カーネル関数は次のように定義される。

$$K(x, y) = \langle \phi(x), \phi(y) \rangle \quad (1)$$

2.2 Kullback-Leibler カーネル

本研究において筆者らは Kullback-Leibler (KL) カーネル [5] というカーネル関数を使用した。このカーネル関数は、KL 情報量という 2 つの確率分布間の近さを測る指標である関数をカーネル関数へと拡張したものである。KL カーネルは次の式で表される。

$$SD(A, B) = \sum_{k=1}^M \left\{ A(k) \log \frac{A(k)}{B(k)} + B(k) \log \frac{B(k)}{A(k)} \right\} \quad (2)$$

$$K_{KL}(A, B) = \exp[-aSD(A, B)] \quad (3)$$

ここで a はカーネル関数のパラメータである。本研究においては確率分布ではなく正規化された周波数スペクトルを取り扱うため、上式のように離散化した KL カーネルを使用した。 $A(k), B(k)$ はそれぞれ離散正規化スペクトル A, B の k 番目の周波数成分を表す。スペクトル A, B が完全に一致するとき KL カーネルの値は 1 となり、形状が違っていきにつれその値は小さくなる。

例として図 1~図 3 に示すような 3 つの単純スペクトルを考える。従来のユークリッド距離による類似度評価を行うと、スペクトル 1 に対してスペクトル 2, スペクトル 3 は同じ類似度となる。しかし、スペクトル形状を考慮するならばスペクトル 1 と同様に山が 1 つのスペクトル 3の方がスペクトル 1 に大して大きい類似度を示すべきである。

KL カーネルで考えると、対称化 KL 情報量 SD が小さいほどスペクトル間の類似度が大きい。スペクトル 1, 2 に対して

$$\begin{aligned} SD(1, 2) &= -0.1 \log \frac{0.3}{0.4} + 0.2 \log \frac{0.4}{0.2} - 0.1 \log \frac{0.3}{0.4} \\ &= -0.2(\log 3 - 2 \log 2) + 0.2 \log 2 \\ &= 0.6 \log 2 - 0.2 \log 3 \end{aligned} \quad (4)$$

一方、スペクトル 1, 3 に対して

$$\begin{aligned} SD(1, 3) &= 0.1 \log \frac{0.3}{0.2} - 0.2 \log \frac{0.4}{0.6} + 0.1 \log \frac{0.3}{0.2} \\ &= 0.2(\log 3 - \log 2) - 0.2(\log 2 - \log 3) \\ &= -0.4 \log 2 + 0.4 \log 3 \end{aligned} \quad (5)$$

2 つの SD を比較すると、

$$\begin{aligned} SD(1, 2) - SD(1, 3) &= \log 2 - 0.6 \log 3 \\ &\simeq 0.38 \end{aligned} \quad (6)$$

となり、 $SD(1, 2) > SD(1, 3)$ なのでスペクトル 3の方が類似度が高くなる。このように、KL カーネルは内積としてスペクトル間の類似度をその形状を考慮して測ることができる関数である。

3. SOM とカーネル SOM

3.1 SOM のアルゴリズム

SOM は入力層と出力層の 2 層のネットワーク構造を持ち、基本的に競合過程、協調過程の 2 つの過程から成る。SOM に

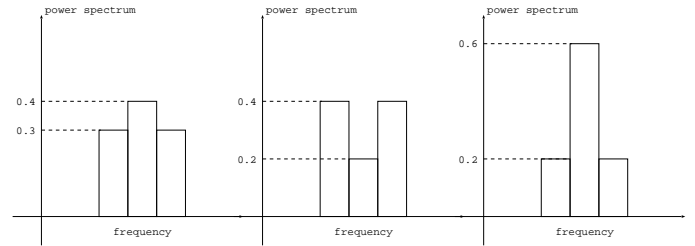


図 1: スペクトル 1 図 2: スペクトル 2 図 3: スペクトル 3

における K 個のニューロンをノードと呼び、各ノードは出力層において格子状に配置されており、そこで参照ベクトルと同じ n 次元のベクトルを持つ。競合過程においては、ある入力 $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ と参照ベクトル $m_i = (m_{i1}, m_{i2}, \dots, m_{in})$ を用いて次のような方法で最も入力に近いノードを学習ステップ t における勝者ノードとする。

$$m_i(t) = \arg \min_{1 \leq i \leq K} \|x(t) - m_i(t)\| \quad (7)$$

競合過程は WTA (Winner Takes All) の原則で行われるが、これは局所的な動作であり、全体の大局的な動作は協調過程によって行われる。具体的には、勝者ノードとその近傍のノードがそれぞれのノード間の位相情報の保持を次の学習則に従って行う。

$$m_i(t+1) := m_i(t) + h_{li}(t)[x(t) - m_i(t)] \quad (8)$$

出力層における位相的近傍の定義はマップの格子の形による。一般的に長方形か六角形格子を用いる。近傍 N_i は時間に関する単調減少関数であり、学習を重ねるごとに N_i の半径が小さくなり、学習を行うノードの数が減っていく。 h_{li} は近傍関数と呼ばれ、学習を重ねるごとに減少する学習率パラメータ $\alpha(t)$ を用いて定義される。また、ガウス関数によって滑らかな近傍関数を用いることも可能である。

ところが、上で述べた SOM (オンライン型 SOM) のアルゴリズムは入力データの順番によって出力結果が変化してしまう可能性がある。また、学習率パラメータ $\alpha(t)$ の値によって結果が変わることもある。これに対して、全てのデータを最初に読み込んでから参照ベクトルを一括して更新することで、データの順序依存性を抑え、学習時間を大幅に短縮させることができるバッチ型 SOM というものが存在する。このアルゴリズムでは学習率パラメータを必要としない。バッチ型 SOM におけるノードの更新式は次のようなものである。

$$m_i(t+1) = \frac{1}{|N_i|} \sum_{x_k \in N_i} x_k \quad (9)$$

ここで $|N_i|$ とは m_i の近傍にあるノードが勝者となっている入力データの数の総和である。

3.2 カーネル SOM のアルゴリズム

カーネル SOM [4] とは、カーネル関数を用いて高次元に写像された入力データのクラスタリングを行う SOM である。入力データに適したカーネル関数を選択することで、よりそのデータに特化したクラスタリングが可能となる。

カーネル SOM においては勝者ノード決定のために以下の非類似度を考える。

$$d_{ik} = \|\phi(x_k) - m_i\|_S^2 \quad (10)$$

ここで m_i は元の空間ではなく高次元特徴空間における参照ベクトルである。カーネル関数を用いることで、非類似度の更新式を m_i の空間上の位置を用いることなく計算することができるようになる。

通常の SOM と同様に、カーネル関数を利用したバッチ型 SOM も存在する。本研究ではこのバッチ型カーネル SOM を使用した。非類似度の更新式は $K_{kk} = \langle \phi(x_k), \phi(x_k) \rangle$, $K_{jk} = \langle \phi(x_j), \phi(x_k) \rangle$, $K_{jl} = \langle \phi(x_j), \phi(x_l) \rangle$ として次のように表される。

$$d_{ik}(t+1) = K_{kk} - \frac{2}{|N_i|} \sum_{j \in N_i} K_{jk} + \frac{1}{|N_i|^2} \sum_{j \in N_i} \sum_{l \in N_i} K_{jl} \quad (11)$$

4. SOFC と AE 法

この章では、実験に用いたデータを得るために行った固体酸化燃料電池 (SOFC)[6] とアコースティック・エミッション (AE) 法について説明する。燃料電池は、低公害、低騒音などの特徴を持ち実用化が期待される発電装置である。中でも固体酸化燃料電池 (SOFC) は高い発電効率を持つが、高温環境で動作するために長時間使用すると亀裂や変形が起こるため、実用化のためには損傷状況を診断するシステムが必要である。そこで近年、物理的な損傷に対しては、破壊の際に発生する微弱な弾性波をセンサーで測定するアコースティック・エミッション (AE) 法を用いることによって破壊の様子を計測することに成功している [7]。SOFC の損傷評価のために、AE 信号に対してデータマイニングの手法を応用する研究が行われている [3]。

5. 実験

5.1 実験に用いたデータ

本論文で実験に用いたデータは、東北大学多元物質科学研究所にて行われた固体酸化燃料電池 (SOFC) における損傷評価試験のデータを使用した。この試験は、前述のアコースティック・エミッション (AE) 法を用いて SOFC の運転中に起こる亀裂や変形による弾性波をセンサーで測定するものである。得られたデータは図 4 に示すような波形信号であり、サンプリング間隔 10^{-6} s、計測時間 60 時間の試験において得られた AE 信号を実験に用いた。

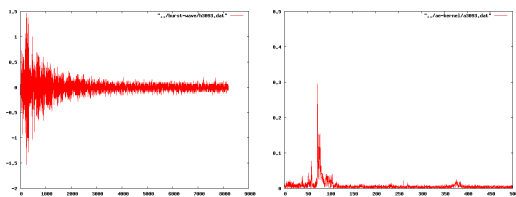


図 4: AE 波形の例 (左) とそのスペクトルデータ (右)

5.2 取得データと前処理

試験により得られた AE 信号はノイズを含んでいるため、閾値に従って 1,259 個の波形を切り出した。その後、高速フーリエ変換 (~ 500 kHz) により全ての AE 波形をスペクトルデータ化した。スペクトルデータを KL カーネルへの入力とするため、各データの総和が等しくなるように正規化を行った。

5.3 クラスタリング及び可視化

前処理を行った AE スペクトルデータに対し、SOM 及びカーネル SOM を用いてクラスタリング及び可視化を行った。両者ともバッチ型のアルゴリズムを使用しており、マップはノード数 10×10 の正方形格子で、学習回数は 100 回とした。KL カーネルにおける定数は最も境界が良く出ていた $a = 0.05$ とした。次に可視化されたマップを示す。格子点がノード=クラスタを示し、高さが隣のクラスタとの距離を示す。クラスタ間距離は U-matrix[8] によって求めた。図 5 を見ると、SOM に比べてクラスタ間の距離を示す山の数が多いことが分かる。更に、図 6 で AE の現れる頻度を見てみると、SOM においては全く AE が配置されなかったノードが全体の 1 割近く存在していたのに対し、カーネル SOM は全てのノードに AE が広く分布していた。

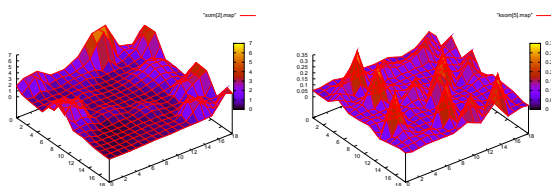


図 5: SOM(左) とカーネル SOM(右) のクラスタ間距離マップ

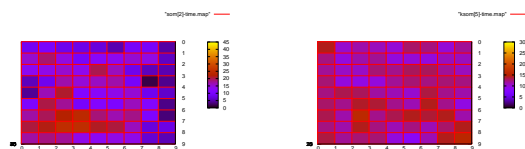


図 6: SOM(左) とカーネル SOM(右) における発生頻度マップ

5.4 時系列評価

更に詳しく SOM とカーネル SOM を比較するために、時系列でのクラスタリングの様子を比較した。具体的には AE 信号を切り出された順番に 100 個ずつ区切り、それぞれの時間帯でマップ上のどの領域にクラスタリングされているかを確認した。図 8 は時系列で AE が多く発生する領域を示したもので、図 7 は図 8 において AE の発生頻度が高い領域とクラスタ境界のマップを重ねたものであり、SOM においては現れる領域の間にほとんど境界がないのに対し、カーネル SOM では現れる領域が境界で区切られていることが分かる。

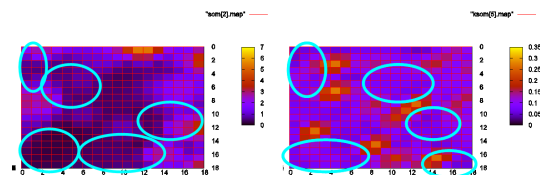


図 7: クラスタ間距離マップ上における領域

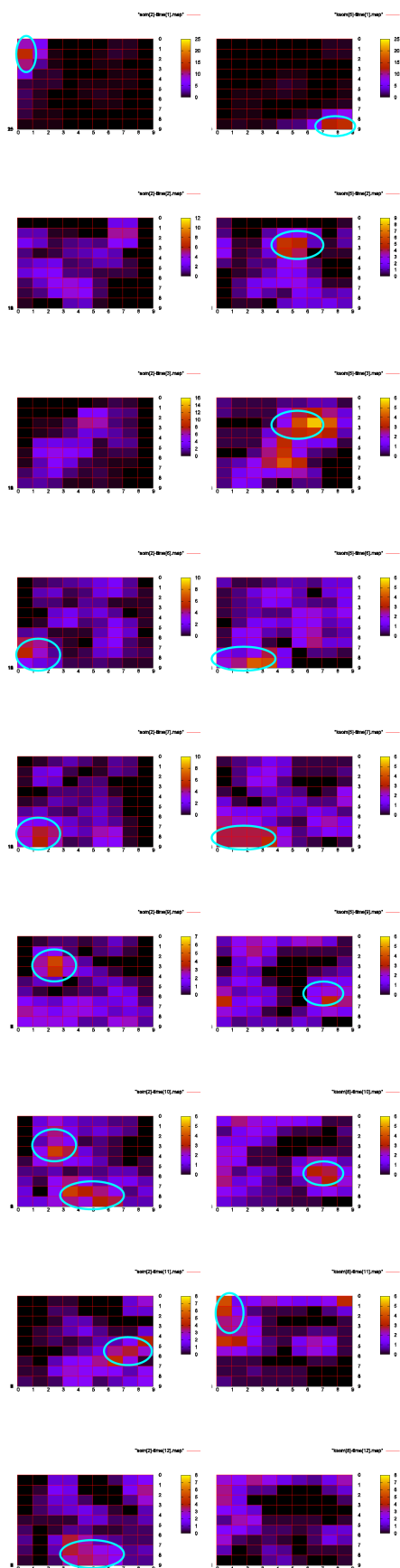


図 8: SOM(左) とカーネル SOM(右) における時系列での発生頻度マップ (上から下の順)

6. まとめ

本論文では、波形信号のスペクトルデータをクラスタリング及び可視化するために、従来の SOM ではなく非線形データの解析に用いられるカーネル法を SOM に応用したカーネル SOM を使用し、スペクトルの類似度判別に用いられる KL カーネルを用いた。SOM とカーネル SOM の比較実験においては SOFC の損傷評価試験における AE 信号のスペクトルデータを使用し、実験の結果から SOM に比べてカーネル SOM はクラスタ間の境界がはっきり出ることや、時系列で現れる領域が境界で区切られていることなどの特徴が得られた。これは、カーネル SOM がスペクトル間の微妙な違いを見分けることができ、スペクトルの形状を考慮したクラスタリングができているためと推察される。今後は、SOM とカーネル SOM の正確な比較のためにラベル付きスペクトルデータを用いたクラスタリングを行ったり、クラスタリング結果を左右するパラメータを微調整していくことなどが課題として挙げられる。SOFC のデータに関してもこれによりオンラインでの損傷評価に近づくことができると考えられる。更に、他の波形信号のスペクトルデータに対しても KL カーネルを用いたカーネル SOM の有用性を示すことも課題である。

謝辞

本研究は、文部省特別教育研究経費により行われた。

参考文献

- [1] G.Manson, K.Worden, K.Holford, R.Pullin " Visualisation and dimension reduction of acoustic emission data for damage detection " *Journal of Intelligent Material Systems and Structures* 12 (8), pp.529-536, August 2001.
- [2] 徳高平蔵, 藤村喜久朗, 山川烈監修 " 自己組織化マップ応用事例集 " 海文堂, 2002.
- [3] 今中規景 " SOM を用いた固体酸化物燃料電池の損傷評価 " 大阪大学大学院情報科学研究科修士論文, 2007.
- [4] 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uzzy学会誌, vol.17, pp.88-94, Feb, 2005.
- [5] 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.
- [6] 田川博章 " 固体酸化物燃料電池と地球環境 " アグネ承風社, 1998.
- [7] 佐藤一永, 橋田俊之, 八代圭司, 湯上浩雄, 川田達也, 水崎純一郎 " 模擬作動環境下における固体酸化物燃料電池の機械的損傷評価法の開発 " *Journal of the Ceramic Society of Japan*, vol.113, pp.562-564, Jun 2005.
- [8] A.Ultsch " Maps for the Visualization of high-dimensional Data Spaces " *Proc. Workshop on Self organizing Maps*, 2003.