CS－19　三辺測量と多次元尺度構成法

東京大学工学部　正会員　清水英範

１．はじめに

多次元尺度構成法（Multi-dimensional scaling: ＭＤＳ）とは、簡単に言えば、対象間に距離の測度が与えられた時、これを最も再現するように対象を多次元空間（一般に平面）に点として配置する手法である。人間の知覚構造を探る手法として心理学の分野で発達した手法であるが、現在では複雑な構造を視覚的に分かりやすく捉える手法として広範な分野で利用されている。

さて、測量学の分野には古くから三辺測量という方法がある。距離や角の観測から最小二乗法によって地点の座標を求めることが測量の基本的な方法であるが、このうち距離のみの観測に依存する方法が三辺測量である。すなわち、三辺測量は距離が比例尺度の距離として与えられたときのＭＤＳ（距離が間隔尺度以上で与えられるＭＤＳを計量的ＭＤＳという。以後、単にＭＤＳと表記する。）として位置づけられる。

本稿の主たる目的は、この三辺測量がＭＤＳの手法としてもつ意味について考察することにある。なお、三辺測量にしてもＭＤＳにしても、距離の観測から位置を求める逆解析である。これらの中で利用される逆解析の手法を紹介することも本稿の目的である。

なお、簡単のため、n 個の対象（点）とすべての点間距離 $o_{ij}(i,j=1,2,\ldots,n)$ が与えられたときに、これらの点を平面に配置する問題を考える。

２．代表的な計量的多次元尺度構成法

まず、従来の代表的なＭＤＳの手法を概観する。

（１）Torgerson の多次元尺度構成法

最も古典的でよく知られた方法である。まず、観測された距離から、Young & Householder の変換によって配置する点の重心を原点とする内積行列 $\boldsymbol{B}\ (n\times n)$ を求める。そして、座標 $\boldsymbol{A}\ (n\times 2)$ を、

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{C}\,\boldsymbol{\Lambda}^{1/2} \tag{1}$$

のように導く。ただし、$\boldsymbol{\Lambda}\ (2\times 2)$ は $\boldsymbol{B}$ の固有値のうち大きなものから２つを順に対角要素とする対角行列、$\boldsymbol{C}\ (n\times 2)$ はこれらの固有値に対応する正規化された固有ベクトルを列ベクトルとする行列である。Torgerson の方法は、このように内積行列の固有値・固有ベクトル分解によって代数的に解を一意に導けるという便利さのため、よく利用されたのである。最小二乗法の観点からは、この方法は次のように解釈される。まず、内積は座標軸の回転に対して不変であるので、座標軸を固定するために、$\boldsymbol{A}^t\boldsymbol{A}=$（対角行列）という制約をおく。これは、座標の分散を軸方向に最大にする解（これを主軸解という）を求めることを意味する。このとき、式(1)は

$$\phi^2=trace\,(\boldsymbol{B}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^t)^2 \tag{2}$$

を最小化する唯一の解になる。すなわち、内積行列から最小二乗法で座標を求めるという不良設定の逆問題を主軸解という制約条件によって解くのである。

この方法の問題は、距離そのものではなく内積を近似することにある。このため、同じ大きさの距離であっても、距離を構成する２点の位置によって、その距離の再現精度は異なるという不合理な結果をもたらす。

（２）最小二乗多次元尺度構成法

観測された距離を再現するように点を平面に配置するという目的に対し、より素直な定式化は、

$$min.\ \varphi^2=\sum_{i<j}(o_{ij}-d_{ij})^2 \tag{3}$$

であろう。ただし、d_{ij} は平面上の距離で、また o_{ij} と d_{ij} のスケールは同じで、残差の重みは一定とする。

これは三辺測量の定式化と同じである。測量では一般にGauss-Newton法で解くが、ＭＤＳでは特に決まった方法はなく、収束の迅速性や安定性の観点から多種の方法が提案されている。測量では、一般に誤差が十分小さく、座標の近似値を比較的容易に与えることができるのに対し、ＭＤＳではこれが期待できないためか。なお、Newton法系の方法で解く場合、逆行列をとるべき行列は一般に特異となる。距離のみが観測された状態では座標の最適解が無数にあるということに起因する。このような場合には、一般にMoore-Penroseの一般逆行列（ＭＰ逆行列）が用いられる。ＭＰ逆行列を利用する意味は後述する。その他、適当な初期値か

ら交互最小二乗法で解を収束させる方法も用いられる。

以上が従来から提案されている代表的なＭＤＳの基本的なアプローチである。これらのＭＤＳやその応用事例を概観すると不思議に思えることが一つある。それは、配置した点の座標の精度を検討するという試みがなされていないことである。ＭＤＳでは、距離を再現する空間の次元数を検討するという目的の場合もあるが、一般には再現精度がそれほど高くないのは承知の上で平面に点を配置し、構造を視覚的に捉えることを主たる目的とすることが多い。このような場合には、点ごとに座標の精度を求めておかないと不合理な断定的解釈を行ってしまう危険性があるだろう。

（３）最尤多次元尺度構成法

Ramsayは、距離の観測値に対数正規分布を仮定し、最尤法によって座標を推定する方法を提案した。対数正規分布の仮定は、距離の大きさに応じて誤差も大きくなるという経験則（観測距離によって標準偏差を変える必要はない）によるところが大きい。1978年、Ramsayは最尤推定量の漸近正規性から座標の信頼区域を求めた。しかも、解の確定に主軸解の制約を加えた場合と、ＭＰ逆行列を利用した場合の比較を行い、ＭＰ逆行列の有効性を示した。ＭＤＳにおいて配置した点の精度を議論した多分初めての研究である。

３．三辺測量による計量的多次元尺度構成

（１）固定解法

三辺測量では、式(3)をGauss-Newton法で解く。残差方程式（$e_{ij}=o_{ij}-d_{ij}$）を未知座標の近似値まわりにTaylor展開すると結局以下のようになる。

$$e = AX - M \tag{4}$$

ここで、X は未知座標ベクトル、e は残差ベクトル、A と M は定数の行列とベクトル。すなわち、最小二乗法による解は

$$X = (A^tA)^{-1}A^tM \tag{5}$$

となる。これを収束するまで繰り返し、座標を求める。

ここで、前述の通り、A^tA は特異となるため実際には式(5)は成立しない。測量では、一般に測量網の中に座標既知の基準点を設けるので、未知座標は減り、結果として A^tA は正則となる。解を求めるには最低３座標を固定すればよい。（A^tA のランク欠損は３）例えば、任意の１点を原点とし、もう１点を座標軸上に限定する。３座標を固定したときの残りの未知座標ベクトルを新たなに X とおけば、式(5)によって解は得られる。これは、距離を再現するという問題に対して制約を与えるものではない。三辺測量の誤差調整法は、最小二乗ＭＤＳとして機能することは明らかである。

（２）フリーネットワーク解法

測量では、座標の最確値の精度が決定的に重要である。ＭＤＳにおいても然りであることは前に述べた。三辺測量をＭＤＳに利用すれば、座標の精度を求めることは一見容易である。残差の二乗和から観測値の不偏分散を求め、式(5)に誤差伝播の法則を適用して座標の分散を求めればよい。しかし、実際はそう単純ではない。なぜなら、座標を固定するとはその座標の分散を０と仮定することに他ならないからである。すなわち、どの３座標を固定するかによって各座標の精度が異なるという不合理な結果をもたらす。

この問題を回避するには、測量のフリーネットワーク（ＦＮ）解法を適用すればよい。どの座標も固定せずに、測量網の形状のみを求める方法である。具体的には、式(5)を次のように変える。

$$X = (A^tA)^{-}A^tM \tag{6}$$

ここで、$(A^tA)^{-}$ はＭＰ逆行列、X は全座標を未知とした座標ベクトル。この方法は、座標ベクトルのノルム最小化という制約条件を与えて解くことを意味する。また1972年、Mittermayer はこの方法が

$$min.\ trace\,(\Sigma_X) \tag{7}$$

を与えることを示した。（Σ_X は分散共分散行列）すなわち、ＦＮ解法によれば、特定の座標の分散に何ら制約を与えず、全座標の分散を求めることができる。

４．おわりに

三辺測量のＦＮ解法は、Ramsayの最尤ＭＤＳにおいて誤差分布を正規分布とし、これをＭＰ逆行列を用いたGauss-Newton法で解くことと基本的に同じである。測量学でＦＮ解法が普及したのはMittermayerの研究以降であるが、1960年代から結果的にそれと等価な方法は提案されていた。筆者の単に勉強不足によるのであろうが、ＭＤＳの分野では、何故、Ramsayの研究まで座標の精度を検討する試みがなかったのか、また三辺測量のＦＮ解法と同じ試みが何故なされなかったのか、等々いろいろ疑問が残る。