

# シグネチャ法入門

杉浦 望実<sup>†</sup>

(受付 2021 年 12 月 31 日 ; 改訂 2022 年 7 月 1 日 ; 採択 7 月 1 日)

## 要 旨

地球科学などで観測される系列データは、多次元空間内の経路とみなすことができる。経路を効果的に読み取るには、経路内の点の順序や非線形性を忠実に記述することができるシグネチャと呼ばれる数列に変換することが有効である。特に、シグネチャの各項の線形結合を使えば、経路の集合上で定義された任意の非線形関数を近似できる。このことにより、系列データにラベルが付されたデータセットを学習するには、経路のシグネチャとラベルの組に対して線型回帰を適用すればよく、ラベルが非線形関数で決められる場合でも高性能な学習ができる。系列データを活用する機械学習やデータ同化にシグネチャ法を取り入れることで、これまで見落とされていた情報が抽出できる可能性がある。

キーワード：シグネチャ、機械学習、系列データ。

## 1. はじめに

地球科学をはじめとする様々な実証的な科学研究においては、系列データを分析することがしばしば必要になる。ここで、系列データというのは、例えばあるパラメータに沿って値が定義された多次元空間上の経路  $X : [0, 1] \ni t \mapsto X_t \in \mathbb{R}^d$  の上のいくつかの点  $X_{t_1}, \dots, X_{t_m}$  を観測したもののことである。これらをばらばらの点と捉え、モデルと比較したり機械学習したりするのが素朴な扱い方であろう。しかし、これらの点が順番に並んでいることに意味があることもありえる。本稿では、順番の情報を失わないように、系列データを効率的に読み取る方法について述べる。この方法においては、経路上の点群として与えられる観測データを、シグネチャ (e.g., Lyons et al., 2007; Friz and Victoir, 2010) と呼ばれる数列に変換することが核心にあるため、シグネチャ法と呼ぶことにする。シグネチャは、ラフパス理論 (Lyons, 1998) という比較的新しい数学理論における主要概念のひとつである。

系列データをシグネチャに変換することにより、高性能かつ効率的な機械学習が可能になることが過去の研究において示されている。例えば、Fermanian (2021) には、公開データ Motion Sense (Malekzadeh et al., 2018), Urban Sound (Salamon et al., 2014) を対象とした機械学習において、シグネチャ法が他の最先端手法に比して優位かまたは同程度の性能を効率的に達成することが示されている。一方、Quick Draw! (Google, 2017) に関しては、極めて高い計算効率で一定の性能が得られている。Li et al. (2019) には、人間の動作把握への応用例において、シグネチャ法が他手法よりも好成績を効率的に達成することが示されている。その他にも、医療データ (Arribas et al., 2018; Morrill et al., 2019; Moore et al., 2019), 文字認識 (Xie et al., 2018), 金融時系列 (Lyons et al., 2014), 地球科学 (Sugiura and Hosoda, 2020) など多方面への

<sup>†</sup> 海洋研究開発機構 海洋観測研究センター : 〒237-0061 神奈川県横須賀市夏島 2-15

応用例がある。

本稿では、シグネチャを使う理由を述べた後、シグネチャの定義と性質を示し、最後に機械学習への応用について議論する。説明にあたっては、原理的な側面が主になるものの、数学的な厳密性よりも応用とのつながりを重視する。

## 2. 動機づけ

系列データを扱う際になぜシグネチャが必要になるかを2つの例を挙げて説明する。

### 2.1 多項式回帰

点とそこでの評価値の集合  $\{(x_i, y_i) \mid x_i, y_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, N\}$  を考える。このデータを多項式回帰するには、次のコスト関数を最小化することで、多項式の係数  $w = (w_0, \dots, w_M)$  を最適化すればいい(図1)。

$$(2.1) \quad J(w) = \sum_{i=1}^N \left( y_i - \sum_{k=0}^M w_k x_i^k \right)^2.$$

これと同様のことを経路の集合に対して行いたい。経路とそれに対する評価値の集合  $\{(X_i, y_i) \mid y_i \in \mathbb{R}, i = 1, \dots, N\}$  が与えられているとする。各経路  $X_i$  は区間  $[0, 1]$  から  $\mathbb{R}^d$  への写像  $X_i : t \mapsto X_{i,t}$  である。各経路をシグネチャに変換することにより、経路の集合に対する回帰が可能になる。具体的には、次のコスト関数を最小化すればいい。

$$(2.2) \quad J(w) = \sum_{i=1}^N \left( y_i - \sum_{k=0}^M w_k \mathcal{S}^{(k)}(X_i) \right)^2.$$

ここで  $\mathcal{S}^{(k)}(X_i)$  は経路  $X_i$  に対して定められたシグネチャと呼ばれる数列の第  $k$  番目の項である。ただし、以下ではシグネチャの各項 ( $k$ ) を多重添字で付番することがある。このように各経路をあたかもひとつの点のように扱って「多項式」回帰することを可能にするのが、シグネチャ法の役目のひとつである。

点の集合に対する多項式回帰においては、単項式  $1, x, \dots, x^M$  が回帰曲線(図1)の基底関数であるのに対して、経路の集合に対する回帰においては、シグネチャ  $\mathcal{S}^{(0)}(X), \dots, \mathcal{S}^{(M)}(X)$  が回帰超曲面の基底関数となる。つまり、図1の横軸を、点の集合ではなく、経路の集合に置き

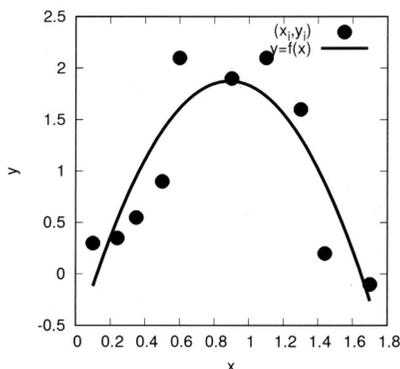


図1. 多項式回帰 ( $y = w_0 + w_1x + w_2x^2$ ).

換えた場合に相当する。

## 2.2 非可換テイラー展開

区間  $[0, t]$  から  $d$  次元ユークリッド空間  $\mathbb{R}^d$  への写像  $X : u \mapsto X_u$  を経路と呼ぶ。  $Y : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^e$  は、  $d$  個の滑らかなベクトル場  $V_i : \mathbb{R}^e \rightarrow \mathbb{R}^e$ ,  $i = 1, \dots, d$  を用いた次の常微分方程式で定められるとする。

$$(2.3) \quad \begin{bmatrix} dY_u^{(1)} \\ \vdots \\ dY_u^{(e)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_1^{(1)}(Y_u) & \cdots & V_d^{(1)}(Y_u) \\ \vdots & & \vdots \\ V_1^{(e)}(Y_u) & \cdots & V_d^{(e)}(Y_u) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dX_u^{(1)} \\ \vdots \\ dX_u^{(d)} \end{bmatrix}.$$

これは  $dY_u = V(Y_u)dX_u$  とも書ける。常微分方程式(2.3)には、再帰型ニューラルネット (Liao et al., 2019) や確率微分方程式など多くの例が含まれる。  $Y$  は  $X$  に駆動される制御型方程式になっている。

$Y_t$  の滑らかな関数  $F : \mathbb{R}^e \rightarrow \mathbb{R}$  による評価値  $F(Y_t)$  を  $X$  に沿ってテイラー展開する (e.g., Litterer and Oberhauser, 2011; Baudoin and Zhang, 2012)。テイラー展開は、微分積分学の基本定理の適用を繰り返すことによって導出することができる。なお、以下で上付きと下付きの同一の添字の組に対しては、総和を施すものとする。

関数  $F$  の方向微分を  $\nabla_{V_i} F(Y_u) := V_i^{(k)}(Y_u) \frac{\partial}{\partial Y^{(k)}} F(Y_u)$  と書くと、

$$(2.4) \quad dF_{u_1} = \frac{\partial F}{\partial Y^{(k_1)}}(Y_{u_1}) dY_{u_1}^{(k_1)} = \nabla_{V_{i_1}} F(Y_{u_1}) dX_{u_1}^{(i_1)}$$

なので、微分積分学の基本定理より、

$$(2.5) \quad F(Y_t) = F(Y_0) + \int_{0 < u_1 < t} \nabla_{V_{i_1}} F(Y_{u_1}) dX_{u_1}^{(i_1)}.$$

式(2.5)内の  $\nabla_{V_{i_1}} F(Y_{u_1})$  に微分積分学の基本定理を適用して代入すると、

$$(2.6) \quad F(Y_t) = F(Y_0) + \nabla_{V_{i_1}} F(Y_0) \int_{0 < u_1 < t} dX_{u_1}^{(i_1)} + \int_{0 < u_1 < u_2 < t} \nabla_{V_{i_1}} \nabla_{V_{i_2}} F(Y_{u_1}) dX_{u_1}^{(i_1)} dX_{u_2}^{(i_2)}.$$

この操作を繰り返し適用することにより、以下のように  $n$  次の非可換テイラー展開が得られる (e.g., Boedihardjo et al., 2015)。

$$(2.7) \quad F(Y_t) = \sum_{k=0}^n \nabla_{V_{i_1}} \cdots \nabla_{V_{i_k}} F(Y_0) \int_{0 < u_1 < \cdots < u_k < t} dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_k}^{(i_k)} + R_{n+1}(t),$$

$$(2.8) \quad R_{n+1}(t) = \int_{0 < u_1 < \cdots < u_n < t} (\nabla_{V_{i_1}} \cdots \nabla_{V_{i_n}} F(Y_{u_1}) - \nabla_{V_{i_1}} \cdots \nabla_{V_{i_n}} F(Y_0)) dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_n}^{(i_n)}.$$

式(2.7)の2次以上の項においては、方向微分が可換でないため、通常のテイラー展開における  $X_t^{(i)} - X_0^{(i)}$  の冪のかわりに、反復積分(後述)  $\int_{0 < u_1 < \cdots < u_k < t} dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_k}^{(i_k)}$  が現れる。

式(2.7)が示唆するのは、システム  $\{Y_0, F, V_1, \dots, V_d\}$  が未知な場合、評価値  $F(Y_t)$  と経路の反復積分  $\{\{\int_{0 < u_1 < \cdots < u_k < t} dX_{u_1}^{(i_1)} \cdots dX_{u_k}^{(i_k)}\}_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d}\}_{k=1, \dots, n}$  との組をデータサンプルとして持っていれば、重回帰によりシステム同定ができるということである。

## 3. シグネチャの概要

経路に対して定まるシグネチャという数列の定義と性質について述べる。特に、シグネチャ

が経路を独立変数とする関数の空間における基底関数になっていることが重要である。

### 3.1 シグネチャの定義

$X : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^d$  を経路とする。また、区間  $[0, 1]$  の分割を  $D$  として、経路の長さを  $\ell = \sup_D \sum_{[t_{i-1}, t_i] \in D} |X_{t_i} - X_{t_{i-1}}|$  で定義する。この長さ  $\ell$  が有限であることを有界変動を持つという。有界変動を持つ経路に対して、1 次の反復積分を次のように定義する。 $i_1 = 1, \dots, d$  に対して、

$$(3.1) \quad \mathcal{S}^{(i_1)}(X) = \int_{0 < t_1 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} = X_1^{(i_1)} - X_0^{(i_1)}.$$

2 次の反復積分は、 $i_1, i_2 = 1, \dots, d$  に対して、

$$(3.2) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0, t_2]}) dX_{t_2}^{(i_2)} = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)}.$$

ここで、 $X_{[0, t_2]}$  は経路  $X$  の定義域を区間  $[0, t_2]$  に制限したものを表す。これを続けていくと、 $n$  次の反復積分は、 $i_1, \dots, i_n = 1, \dots, d$  に対して、

$$(3.3) \quad \mathcal{S}^{(i_1 \dots i_n)}(X) = \int_{0 < t_n < 1} \mathcal{S}^{(i_1 \dots i_{n-1})}(X_{[0, t_n]}) dX_{t_n}^{(i_n)} = \int_{0 < t_1 < \dots < t_{n-1} < t_n < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} \dots dX_{t_{n-1}}^{(i_{n-1})} dX_{t_n}^{(i_n)}.$$

$n$  段シグネチャ  $\mathcal{S}_n(X)$  は、これらを並べて書いたものである。

$$(3.4) \quad \mathcal{S}_n(X) = \left( \mathcal{S}^{\emptyset}(X), \mathcal{S}^{(\bullet)}(X), \mathcal{S}^{(\bullet\bullet)}(X), \dots, \mathcal{S}^{(\overbrace{\bullet\bullet\bullet}^n)}(X) \right).$$

ここで、 $\bullet$  には、それぞれ  $1, \dots, d$  が入る。0 次の反復積分  $\mathcal{S}^{\emptyset}(X)$  は、常に 1 と定義する。なお、式(3.4)で  $n \rightarrow \infty$  とした無限列のことを  $\mathcal{S}(X)$  と書き、無限段のシグネチャ、または単にシグネチャと呼ぶ。

具体例として、 $d = 2$  の場合の 2 段シグネチャを書くと、

$$(3.5) \quad \mathcal{S}_2(X) = \left( \mathcal{S}^{\emptyset}(X), \begin{bmatrix} \mathcal{S}^{(1)}(X) \\ \mathcal{S}^{(2)}(X) \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \mathcal{S}^{(11)}(X) & \mathcal{S}^{(12)}(X) \\ \mathcal{S}^{(21)}(X) & \mathcal{S}^{(22)}(X) \end{bmatrix} \right) \\ = \left( 1, \begin{bmatrix} X_1^{(1)} - X_0^{(1)} \\ X_1^{(2)} - X_0^{(2)} \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} \frac{1}{2}(X_1^{(1)} - X_0^{(1)})^2 & \int_0^1 (X_{t_2}^{(1)} - X_0^{(1)}) dX_{t_2}^{(2)} \\ \int_0^1 (X_{t_2}^{(2)} - X_0^{(2)}) dX_{t_2}^{(1)} & \frac{1}{2}(X_1^{(2)} - X_0^{(2)})^2 \end{bmatrix} \right).$$

式(3.5)の 2 次の反復積分のうち、2 つの非対角項の差(の 2 分の 1)は 1 次の反復積分  $X_1^{(i)} - X_0^{(i)}$  の冪では表わせないことに注意(Lévy 面積とも呼ばれる)。 $n$  段シグネチャの成分は、1 も含めると、 $1 + d + d^2 + \dots + d^n = (d^{n+1} - 1)/(d - 1)$  個ある。

より正確には、付録 A の式(A.9)に示すように、シグネチャはテンソル代数  $T^n(\mathbb{R}^d)$  の元とみなすことができる。

### 3.2 経路とシグネチャとの対応

区間  $[0, 1]$  で定義された経路  $X$  を時刻  $s$  を境に 2 分割することを考える。この節では、パラメータの範囲がわかるようにこの経路を  $X_{[0, 1]}$  というようにも書く。2 階の反復積分の第  $(i_1, i_2)$  成分

$$(3.6) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[0,1]}) = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)}$$

を考える． $t_1$  と  $t_2$  に関する積分範囲は  $0 < t_1 < t_2 < 1$  であるが，任意の  $0 < s < 1$  を採ると，この範囲は，

$$(3.7) \quad \{s < t_1 < t_2 < 1\} \cup \{0 < t_1 < s < t_2 < 1\} \cup \{0 < t_1 < t_2 < s\}$$

と 3 つの互いに交わらない部分集合に分けることができる．これにより，

$$(3.8) \quad \begin{aligned} \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[0,1]}) &= \int_{s < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} + \int_{0 < t_1 < s < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &\quad + \int_{0 < t_1 < t_2 < s} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &= \int_{s < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} + \int_{0 < t_1 < s} dX_{t_1}^{(i_1)} \int_{s < t_2 < 1} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &\quad + \int_{0 < t_1 < t_2 < s} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \\ &= \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[s,1]}) + \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0,s]}) \mathcal{S}^{(i_2)}(X_{[s,1]}) + \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X_{[0,s]}). \end{aligned}$$

この式が示すのは，経路  $X_{[0,s]}$  と  $X_{[s,1]}$  とを繋げたときの反復積分の計算規則である．

1 階の反復積分の計算に関しては，上記の第 2 項を考えなくていいので，

$$(3.9) \quad \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0,1]}) = \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[0,s]}) + \mathcal{S}^{(i_1)}(X_{[s,1]}).$$

このような計算規則は，容易に高階の反復積分に拡張できる：

$$(3.10) \quad \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X_{[0,1]}) = \sum_{k=0}^n \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_k)}(X_{[0,s]}) \mathcal{S}^{(i_{k+1} \cdots i_n)}(X_{[s,1]}).$$

ここで，右辺の総和のうち  $k=0$  の項においては，添字  $(i_1 \cdots i_k)$  を空集合  $()$  とみなし，0 次の反復積分を用いて  $\mathcal{S}^{()}(X_{[0,s]}) \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X_{[s,1]}) = \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X_{[s,1]})$  と解釈する．同様に， $k=n$  の項においては，添字  $(i_{k+1} \cdots i_n)$  を空集合とみなす．これら反復積分の計算規則は，付録 A の式 (A.7) のテンソル積と整合的であることがわかる．すなわち，経路  $X_{[0,s]}$  と  $X_{[s,1]}$  とを繋げた経路を  $X_{[0,s]} * X_{[s,1]}$  と書くと，

$$(3.11) \quad \mathcal{S}(X_{[0,1]}) = \mathcal{S}(X_{[0,s]} * X_{[s,1]}) = \mathcal{S}(X_{[0,s]}) \otimes \mathcal{S}(X_{[s,1]})$$

という式が成り立つ．これが Chen の恒等式であり，経路を繋げるという操作  $(*)$  とシグネチャのテンソル積  $(\otimes)$  の間の関係(準同型)を表している．

さらに，シグネチャが経路を忠実に表現していることを示す次の事実がある (Hambly and Lyons, 2010)．2 つの経路  $X, Y$  は，同じ経路を往復で辿るような枝状の部分(樹状経路)の違いを除いて等しいとき，樹状同値であるといい， $X \sim Y$  と書く．有界変動を持つ 2 つの経路は，樹状同値であるとき，またそのときに限り，(無限段の)シグネチャが等しい．すなわち，

$$(3.12) \quad X \sim Y \iff \mathcal{S}(X) = \mathcal{S}(Y).$$

### 3.3 シグネチャの成分どうしの積

経路  $X$  を固定し，そのシグネチャの成分(反復積分)の間に成り立つ関係式を導出する． $d$  次元経路  $X$  のシグネチャの第  $(i_1, i_2)$  成分は，

$$(3.13) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) = \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)}$$

であるが、これと経路のシグネチャの第  $(i_3, i_4)$  成分との(実数どうしの)積は、

$$(3.14) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \left( \int_{0 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} \right) \left( \int_{0 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)} \right)$$

であるが、重積分の形で書くと、

$$(3.15) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \int_{0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)} + \\ \dots + \int_{0 < t_3 < t_4 < t_1 < t_2 < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)}.$$

ここで、積分範囲は  $t_1 < t_2$  および  $t_3 < t_4$  の順序を保ちつつ、 $t_1, t_2, t_3, t_4$  を並べ替えるすべての順列に亘る。このような順列のとり方をシャッフル積といい、この場合は、

$$(3.16) \quad 12 \omega 34 = \{1234, 1324, 1342, 3124, 3142, 3412\}$$

となる。これを用いて積を書くと、

$$(3.17) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \int_{0 < t_{\sigma(1)} < t_{\sigma(2)} < t_{\sigma(3)} < t_{\sigma(4)} < 1} dX_{t_1}^{(i_1)} dX_{t_2}^{(i_2)} dX_{t_3}^{(i_3)} dX_{t_4}^{(i_4)} \\ = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \int_{0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_{\sigma^{-1}(1)}}^{(i_1)} dX_{t_{\sigma^{-1}(2)}}^{(i_2)} dX_{t_{\sigma^{-1}(3)}}^{(i_3)} dX_{t_{\sigma^{-1}(4)}}^{(i_4)} \\ = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \int_{0 < t_1 < t_2 < t_3 < t_4 < 1} dX_{t_1}^{(i_{\sigma(1)})} dX_{t_2}^{(i_{\sigma(2)})} dX_{t_3}^{(i_{\sigma(3)})} dX_{t_4}^{(i_{\sigma(4)})} \\ = \sum_{\sigma \in 12\omega 34} \mathcal{S}^{(i_{\sigma(1)} i_{\sigma(2)} i_{\sigma(3)} i_{\sigma(4)})}(X).$$

最後の式は、 $\mathcal{S}^{(i_1 i_2 i_3 i_4)}(X)$  と略記される。すなわち、

$$(3.18) \quad \mathcal{S}^{(i_1 i_2)}(X) \mathcal{S}^{(i_3 i_4)}(X) = \mathcal{S}^{(i_1 i_2 i_3 i_4)}(X).$$

式(3.18)は、任意の多重添字  $I, J$  に拡張できて、

$$(3.19) \quad \mathcal{S}^{(I)}(X) \mathcal{S}^{(J)}(X) = \mathcal{S}^{(I \omega J)}(X).$$

つまり、2つの反復積分の積は、より高次の反復積分の和で書き表せることがわかる。

さらに、経路  $X$  に対する反復積分の線形結合  $f(X) = \sum_I v_I \mathcal{S}^{(I)}(X)$  と  $g(X) = \sum_J w_J \mathcal{S}^{(J)}(X)$  との積は、式(3.19)より、

$$(3.20) \quad f(X)g(X) = \sum_{I, J} v_I w_J \mathcal{S}^{(I \omega J)}(X)$$

となるから、やはり反復積分の線形結合になっている。すなわち、反復積分の線形結合は積に関して閉じており、このことが以下の近似定理につながる。

### 3.4 経路の関数に対する近似定理

有界変動を持つ経路の集合上で定義された連続関数は、常に反復積分の線形結合で一様に近

似できる。このことを、経路の関数に対する普遍近似定理として以下に述べる。テンソル代数  $T^r(\mathbb{R}^d)^*$  や演算  $\langle \bullet, \bullet \rangle$  の定義は、付録 A の式 (A.5), (A.14) を参照のこと。また、経路は樹状同値類として解釈する (式 (3.12) の上の説明参照)。

**定理 1** (Litterer and Oberhauser, 2011; Levin et al., 2013; Kiraly and Oberhauser, 2019). 有界変動を持つ経路の集合  $BV([0, 1], \mathbb{R}^d)$  のコンパクト部分集合  $K$  上の連続関数  $f \in C(K, \mathbb{R})$  と  $\epsilon > 0$  に対して、ある 0 以上の整数  $r$  と  $w \in T^r(\mathbb{R}^d)^*$  があって、

$$(3.21) \quad \sup_{X \in K} |f(X) - \langle w, \mathcal{S}(X) \rangle| < \epsilon$$

とすることができる。

**証明.**  $K$  に属する経路にシグネチャの線形結合を割り当てる関数の集合

$$(3.22) \quad A = \{f : K \ni X \mapsto \langle w, \mathcal{S}(X) \rangle \in \mathbb{R} \mid \exists r \geq 0, w \in T^r(\mathbb{R}^d)^*\}$$

は、 $K$  の各点を分離する多元環となっている。すなわち、以下の性質を持つ。

- (1)  $r$  段シグネチャへの変換  $K \ni X \mapsto S_r(X)$  は連続関数なので (Prop. 7.15 of Friz and Victoir, 2010),  $A \subset C(K, \mathbb{R})$ .
- (2) 関数の和とスカラー倍に関して閉じている:  $f, g \in A, \lambda, \mu \in \mathbb{R} \implies \lambda f + \mu g \in A$ .
- (3) シャッフ積の性質 (3.20) により,  $A$  は関数の積に関して閉じている:  $f, g \in A \implies fg \in A$ .
- (4)  $A$  は定数関数 1 を含む。
- (5) シグネチャの一意性 (3.12) より,  $A$  は  $K$  の点を分離する。実際,  $X \approx Y$  ならばある多重添字  $I$  に対するシグネチャの成分が異なる。このとき, 関数  $X \mapsto S^{(I)}(X)$  は  $A$  に属し  $X$  と  $Y$  とを分離する。

従って、ストーン=ワイエルシュトラスの定理 (Stone, 1937) より,  $A$  は  $C(K, \mathbb{R})$  内で稠密である:  $\overline{A} = C(K, \mathbb{R})$ .  $\square$

定理 1 は、経路の連続関数が  $f(X) \approx \sum_I w_I S^{(I)}(X)$  というように多重添字に亘る反復積分の線形結合によって任意の精度で近似できることを示している。シグネチャの各項  $\{S^{(I)}(X)\}_{I \in (\text{multiindex})}$  が基底関数の役割を果たしていることがわかる。これは、2.1 項で述べた多項式近似において、単項式  $\{1, x, x^2, \dots\}$  が 1 変数関数に対して果たす役割と同等である。

#### 4. シグネチャを用いた機械学習

シグネチャを機械学習に応用する方法について述べ、実データへの適用例を示す。

##### 4.1 シグネチャの計算

経路  $X : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}^d$  の定義域  $[0, 1]$  の分割  $0 = t_0, t_1, \dots, t_m = 1$  を採ると、折れ線 (区分的に線形な経路) は、各区分において

$$(4.1) \quad (X_j)_t = X_{t_{j-1}} + \frac{t - t_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} (X_{t_j} - X_{t_{j-1}}), \quad t \in [t_{j-1}, t_j]$$

と定義される。シグネチャを計算するにあたっては、折れ線に対するシグネチャを考えるだけで充分であることが、Chow-Rashevskii の定理 (Theorem 7.28 of Friz and Victoir, 2010) により保証されている。また、実際のな面でも、系列データは観測点での値を線形に結んだ折れ線と

みなすことができることが多い。

折れ線に対する  $n$  段シグネチャは、次のように計算することができる。ベクトル  $v = (v^{(1)}, \dots, v^{(d)}) \in \mathbb{R}^d$  に対して、線分  $X : [0, 1] \ni t \mapsto vt \in \mathbb{R}^d$  を考える。  $n$  次の反復積分を式(3.3)に従って計算すると、

$$(4.2) \quad \mathcal{S}^{(i_1 \dots i_n)}(X) = \frac{1}{n!} v^{(i_1)} v^{(i_2)} \dots v^{(i_n)}.$$

そして、  $m$  個の線分  $X_1, \dots, X_m$  をつなげた折れ線  $X_1 * \dots * X_m$  に対する反復積分は、Chen の恒等式(3.11)より、  $\mu = 2, \dots, m$  に対して

$$(4.3) \quad \mathcal{S}_n(X_1 * \dots * X_\mu) = \mathcal{S}_n(X_1 * \dots * X_{\mu-1}) \otimes \mathcal{S}_n(X_\mu)$$

と順次計算することができる。なお、  $n$  次の反復積分の計算にはそれより低次の反復積分の情報を用いるので、各  $\mu$  において、  $1, \dots, n$  次の反復積分に対して(3.10)を順番に計算していく。シグネチャの計算を行うための Python ライブラリとして、 `esig` (Kormilitzin, 2017)、 `iisignature` (Reizenstein and Graham, 2020) などがある。

#### 4.2 打ち切り誤差

シグネチャの段数を打ち切った時の非可換テイラー展開(2.2項)の近似精度を調べる。

まず、  $k$  次の反復積分のノルム(付録Aの式(A.10))は以下を満たす (Prop. 2.2 of Lyons et al., 2007)。  $\ell$  を経路  $X : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^d$  の長さとして、

$$(4.4) \quad \left| \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} dX_{u_1} \otimes \dots \otimes dX_{u_k} \right|_{\otimes k} = \left| \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} \dot{X}_{u_1} \otimes \dots \otimes \dot{X}_{u_k} du_1 \dots du_k \right|_{\otimes k} \\ \leq \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} |\dot{X}_{u_1}| \dots |\dot{X}_{u_k}| du_1 \dots du_k \\ = \int_{0 < u_1 < \dots < u_k < t} v^k du_1 \dots du_k \\ = \frac{\ell^k}{k!}.$$

2行目において、付録Aの式(A.11)を用いた。また、3行目において、経路  $X$  はほとんど至るところ微分可能で一定速度  $v = \ell/t$  を持つとした。これは時間パラメータの付け替えにより常に可能である (Prop. 2.2 of Lyons et al., 2007)。

評価値  $y \in \mathbb{R}$  がある滑らかな関数  $F$  を用いて  $y = F(Y_t)$  と表され、さらに  $Y : [0, t] \rightarrow \mathbb{R}^e$  が  $X$  に駆動される微分方程式(2.3)を満たす場合には、2.2項で述べたように、形式的には  $y$  をテイラー展開(2.7)で表すことができる。このとき、  $n$  項までのテイラー展開の剰余は式(2.8)で与えられるが、この大きさを以下に評価する。  $\mathbb{R}^d$  から  $\mathbb{R}^e$  への線形変換(行列)の空間を  $L(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^e)$  と書くことにし、滑らかな関数  $F : \mathbb{R}^e \rightarrow \mathbb{R}$  と滑らかな変換場

$$V : \mathbb{R}^e \rightarrow L(\mathbb{R}^d, \mathbb{R}^e), \quad y \mapsto \begin{bmatrix} V_1^{(1)}(y) & \dots & V_d^{(1)}(y) \\ \vdots & & \vdots \\ V_1^{(e)}(y) & \dots & V_d^{(e)}(y) \end{bmatrix}$$

に対して、演算子  $\nabla_V^n F : \mathbb{R}^e \rightarrow L((\mathbb{R}^d)^{\otimes n}, \mathbb{R})$  を次のように帰納的に定義する。

$$(4.5) \quad \nabla_V^0 F = F, \quad \nabla_V^{\circ(k+1)} F = \sum_{j=1}^e V^{(j)} \partial_j (\nabla_V^{\circ k} F).$$

また、演算子のノルムを次のように定義する.

$$(4.6) \quad \|\nabla_V^{\circ n} F\|_\infty = \sup_{y \in \mathbb{R}^e} |\nabla_V^{\circ n} F(y)|, \quad |\nabla_V^{\circ n} F(y)| = \sup_{x \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes n}} \frac{|\nabla_V^{\circ n} F(y)x|}{|x|_{\otimes n}}.$$

このとき、剰余項(2.8)に対して次の評価が成り立つ (Boedihardjo et al., 2015 の式(1.5)参照).

$$(4.7) \quad \begin{aligned} |R_{n+1}(t)| &= \left| \int_{0 < u_1 < \dots < u_n < t} (\nabla_V^{\circ n} F(Y_{u_1}) - \nabla_V^{\circ n} F(Y_0)) dX_{u_1} \otimes \dots \otimes dX_{u_n} \right| \\ &= \left| \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} \nabla_V^{\circ(n+1)} F(Y_{u_0}) \dot{X}_{u_0} \otimes \dots \otimes \dot{X}_{u_n} du_0 \dots du_n \right| \\ &\leq \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} |\nabla_V^{\circ(n+1)} F(Y_{u_0}) \dot{X}_{u_0} \otimes \dots \otimes \dot{X}_{u_n}| du_0 \dots du_n \\ &\leq \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} |\nabla_V^{\circ(n+1)} F(Y_{u_0})| v^{n+1} du_0 \dots du_n \\ &\leq \|\nabla_V^{\circ(n+1)} F\|_\infty v^{n+1} \int_{0 < u_0 < \dots < u_n < t} du_0 \dots du_n \\ &= \frac{\ell^{n+1}}{(n+1)!} \|\nabla_V^{\circ(n+1)} F\|_\infty. \end{aligned}$$

4行目において、式(4.4)と同様に経路  $X$  はほとんど至るところ微分可能で一定速度  $v = \ell/t$  を持つとした.

まとめると、滑らかなベクトル場の集合  $V$  と滑らかな関数  $F$  が  $\|\nabla_V^{\circ n} F\|_\infty = o(n!/\ell^n)$  を満たす時、テイラー展開は収束し、 $n$  項までの展開の誤差は (4.7) で抑えられる.

### 4.3 線型回帰

3.4項で述べたように、シグネチャを用いて経路に対する非線形関数を近似することができる. このことを利用して、実際の系列データに対して機械学習を適用することを考える. 普遍近似定理によれば、 $d$ 次元経路  $X$  の集合  $K$  に対して定義される実数値連続関数  $f$  は、十分大きな段数  $r$  のシグネチャを線型変換したものと実際上みなしてよい. 従って、実データ  $y \in \mathbb{R}$  は、これに独立同分布に従うノイズを加えた以下のシステムから生成されているとする:

$$(4.8) \quad \begin{aligned} y &= \langle w_{\text{true}}, \mathcal{S}_r(X) \rangle + \zeta, \\ \mathbf{E}[\zeta|X] &= 0, \quad \mathbf{E}[\zeta^2|X] = \sigma^2, \quad w_{\text{true}} \in T^r(\mathbb{R}^d)^*. \end{aligned}$$

ここで、 $\mathbf{E}[\zeta^2|X] = \sigma^2$  は重回帰式の残差が有限の分散を持つことを表している. 一方、このシステムに対するモデルは、段数を  $n < r$  に減らし、ノイズレベルを  $\Sigma \geq \sigma$  に上げて、

$$(4.9) \quad \begin{aligned} y &= \langle w, \mathcal{S}_n(X) \rangle + \xi, \\ \mathbf{E}[\xi|X] &= 0, \quad \mathbf{E}[\xi^2|X] = \Sigma^2, \quad w \in T^n(\mathbb{R}^d)^* \end{aligned}$$

とする. ここで、重み  $w$  を列ベクトル  $w \in \mathbb{R}^{M_n \times 1}$ ,  $M_n = (d^{n+1} - 1)/(d - 1)$  とみなす. また、訓練データセットとして、系列データ  $X_i$  のシグネチャと評価値  $y_i$  との組が

$$(4.10) \quad \mathcal{D} = \{(\mathcal{S}_n(X_i), y_i) \mid i = 1, \dots, N\},$$

と与えられているとして、計画行列  $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^{N \times M_n}$  と列ベクトル  $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{N \times 1}$  の成分を次のように定義する.

$$(4.11) \quad (\mathbf{X})_{ik} = S_r^{(k)}(X_i), \quad (\mathbf{y})_i = y_i, \quad 1 \leq i \leq N, 1 \leq k \leq M_n.$$

ここでの付番 ( $k$ ) は、多重添字の通し番号とする。ガウス=マルコフの定理 (e.g., Plackett, 1949) より、このデータ  $\mathcal{D}$  のもとで最適な重みは、コスト関数：

$$(4.12) \quad J(\mathbf{w}) = (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})^T (\mathbf{X}\mathbf{w} - \mathbf{y})$$

を最小化することによって得られる。特に、 $N > M_n$  で、列ベクトル  $x^{(1)}, \dots, x^{(M_n)}$  が線型独立のとき、この訓練データセット  $\mathcal{D}$  に基づく最適な重み  $\mathbf{w}_D$  は、

$$(4.13) \quad \mathbf{w}_D = (\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T \mathbf{y}$$

となるが<sup>8</sup>、この重みを用いた  $\mathbf{y}$  の予測値は、

$$(4.14) \quad \mathbf{X}\mathbf{w}_D = \mathbf{P}\mathbf{y}, \quad \mathbf{P} := \mathbf{X}(\mathbf{X}^T \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^T$$

と書ける。ここで、 $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  は射影行列または影響行列と呼ばれ、

$$(4.15) \quad \mathbf{P}^2 = \mathbf{P}, \quad \mathbf{P}^T = \mathbf{P}, \quad \text{tr}(\mathbf{P}) = M_n$$

などの性質を持つ (e.g., Cardinali et al., 2004)。ここで、 $\text{tr}$  は対角成分の和。

システム (4.8) が生成したデータ  $y$  をモデル (4.9) で予測する際の二乗誤差は、ノイズを変化させたときの期待値を  $E_\zeta$ 、観測データセットを変化させたときの期待値を  $E_D$ 、系列データに亘る期待値を  $E_X$  として、

$$(4.16) \quad \begin{aligned} & E_{\zeta, D, X} [(y - \langle \mathbf{w}_D, \mathcal{S}_n(X) \rangle)^2] \\ &= E_\zeta [(y - \langle \mathbf{w}_{\text{true}}, \mathcal{S}_r(X) \rangle)^2] + E_X [(\langle \mathbf{w}_{\text{true}}, \mathcal{S}_r(X) \rangle - \langle \bar{w}, \mathcal{S}_n(X) \rangle)^2] \\ &\quad + E_{D, X} [\langle \mathbf{w}_D - \bar{w}, \mathcal{S}_n(X) \rangle^2] \\ &\leq E_\zeta [\zeta^2] + E_X [\langle \pi_{>n}(\mathbf{w}_{\text{true}}), \mathcal{S}_r(X) \rangle^2] + E_D \left[ \frac{1}{N} \Xi^T \mathbf{P} \Xi \right] \\ &\leq \sigma^2 + \left( \frac{\ell^{n+1}}{(n+1)!} \|\nabla_V^{\circ(n+1)} F\|_\infty \right)^2 + \frac{M_n}{N} \Sigma^2 \end{aligned}$$

を満たす。ここで、 $\bar{w} = E_D[\mathbf{w}_D]$ 、 $\Xi$  は平均 0 で分散  $\Sigma^2$  の独立同分布確率変数  $N$  個からなる列ベクトル、 $\ell$  は  $K$  内の経路の長さの上限。なお、右辺各項の評価においては、式 (4.8)、(4.7)、および (4.15) をそれぞれ用いた。右辺の各項は、順に雑音 (ノイズ)、偏り (バイアス)、分散 (バリエーション) と呼ばれる (e.g., Bishop, 2006; Hastie et al., 2009; Mehta et al., 2019)。

サンプル数  $N$  が少ないときにシグネチャの段数  $n$  を増やすと、 $\Sigma$  はやや減るものの  $M_n$  が大きく増え、分散が大きくなる場合がある (過剰適合)。一方、 $n$  を減らすと偏りが大きくなる (過少適合)。このようなバランスを考慮して、2乗誤差を小さくする  $n$  を決める必要がある。これが、この問題に対する偏りと分散のトレードオフである。過剰適合を回避するには、シグネチャの段数を減らす他にも、後述のように、コスト関数 (4.12) に  $L_1$  罰則項をつけることによって重要度の低い重み成分を除外する方法がある (Tibshirani, 1996)。

#### 4.4 実データへの適用例

全球海洋観測プロファイル Argo (Gould et al., 2004) の品質管理に適用した例が、Sugiura and Hosoda (2020) に示されている。

Argo フロートは、約 2000 m の海中から海面まで浮上してゆき、その間に圧力 (P)、塩分 (S)、水温 (T) を観測する。得られた観測プロファイルは、 $(P, S, T)$  座標を持つ  $\mathbb{R}^3$  内の経路とみな

すことができる。ここでは、機械学習の精度を向上させるため、遅れ座標を導入し Lead-lag 変換 (e.g., Chevrete and Kormilitzin, 2016; Fermanian, 2021) という処理を施して、 $\mathbb{R}^6$  内の経路とみなす ( $d = 6$ )。各経路  $X$  には、評価値  $y = 0$  または  $1$  が付与されているものとする。  $y = 1$  は品質管理を合格したという意味であり、  $y = 0$  は不合格という意味である。経路は、  $n = 6$  段のシグネチャに変換してから用いる。データセットの任意の 4 割を訓練データセットとして、残りの 6 割を検証データセットとする。そして回帰における重みを訓練データセットから計算し、その重みを使って検証データセットに属するプロファイル  $X$  に対する  $y$  を予測できるかどうかを調べる。

まず、訓練データセット  $\{(S_n(X_i), y_i) | i = 1, \dots, N\}$  に対して、式(4.12)に  $L_1$  罰則項を加えた次のコスト関数を最小化する重み  $w_*$  を求める。

$$(4.17) \quad J(w) = \sum_{i=1}^N ((w, S_n(X_i)) - y_i)^2 + \alpha \|w\|_1.$$

ここで、  $\|\bullet\|_1$  は多重添字に亘る絶対値の和を表す。

次に、検証データ  $X$  に対する予測値  $\tilde{y}$  は、次式で求められる。

$$(4.18) \quad \tilde{y} = \langle w_*, S_n(X) \rangle.$$

なお、式(4.17)内のハイパーパラメータ  $\alpha > 0$  は、検証データを用いた交差検証の結果をもとに調整する。これは、式(4.16)の誤差を小さくするような  $w$  の自由度を探していることに相当する。実際に採用されたのは、サンプル数  $N = 3.2 \times 10^4$  に対して自由度  $6.7 \times 10^3$  である。ここにおける自由度は、全部で  $(6^{6+1} - 1)/(6 - 1) = 55987$  項あるシグネチャの成分に対する重みのうち、零でないものの総数を指す。

Argo プロファイルと対応するシグネチャの例を図 2 に示す。また、図 3 は訓練データ(左)と検証データ(右)に対する予測結果をヒストグラムで表したものである。少なくとも、しきい値 0.5 よりも低い推定値のデータに、合格プロファイルが混入することはほとんどないと言える。一方、同じしきい値で不合格プロファイルの数割は検知することができることもわかる。論文内では、シグネチャ法を用いた方が対照ケースに比して成績が良いことが示されている。

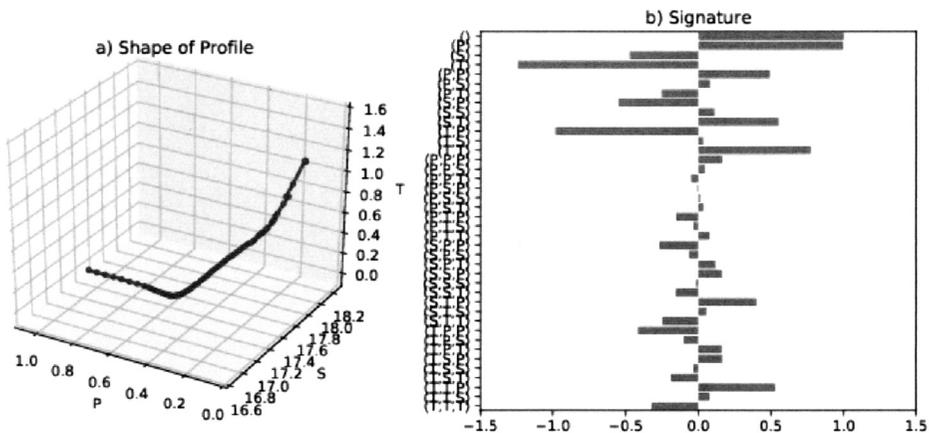


図 2. Argo プロファイル(a)とそのシグネチャ(b). 圧力(P)・塩分(S)・水温(T)を規格化して、3次元空間上にプロファイル  $X$  を表示。シグネチャは、例えば多重添字 ( $PTS$ ) に対して  $S^{(PTS)}(X)$  の値を表示。

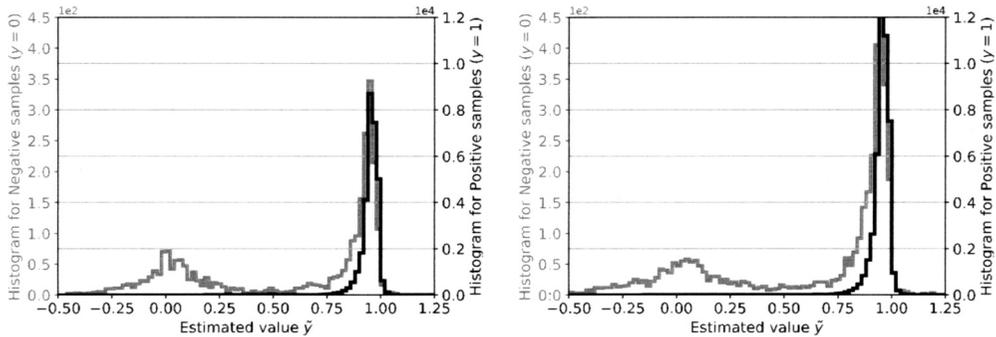


図 3. 訓練データ(左)と検証データ(右)に対する予測値(横軸)のビン毎の度数(縦軸)。黒は  $y = 1$ 、灰色は  $y = 0$  のデータに対する予測値の度数分布を表し、前者の度数目盛りを右軸に、後者を左軸に示す。

## 5. まとめ

シグネチャは経路の連続関数の空間の基底関数であり、系列データとその評価値との間の非線形な関係を表すのに極めて有効である。このことを使って、観測された系列データに対する機械学習を行うことができる。典型的な適用例として、従来の多項式回帰をシグネチャを基底関数とする回帰に置き換えて、系列データに対する教師あり学習を行うことができる。この手順を海洋観測プロフィールとその品質管理フラグに適用した例を示した。

シグネチャ法に関しては、この他にもいろいろな応用の可能性が考えられる。

- 一般に時系列解析は、多次元の経路を読み取ることに帰着するので、時系列の断片を経路と見てシグネチャに変換することで、同様の回帰を行うことができる。特に、将来における何らかの値を経路に対する評価値とみなせば、将来予測が可能である (e.g., Sugiura and Kouketsu, 2021)。この手法においては、非線形状態空間モデルを経路自体が持っている非線形性(シグネチャ)と線形状態空間モデル(重み)とに分離するため、回帰が極めて簡単になる。
- また、データ同化においても、観測されたプロフィールとモデル内のプロフィールを比較する必要が生じるが、そのような場合に両者のシグネチャの差を縮めるというようなコスト関数を設定することにより、品質の向上が期待できる。なぜなら、経路上の各点が近いという線形の問題設定から、経路の性質が近いという非線形の問題設定へと自然に転換することができるからである。

## 謝 辞

貴重な指摘をいただいた査読者に感謝の意を表す。本研究は、JST、AIP 日独仏 AI 研究、JPMJCR20G5 の支援を受けたものである。

## 付 録

### A. テンソル表記

以下のようにテンソルの概念 (e.g., 原, 2019) を導入すると、シグネチャをテンソル代数の元として表すことができる。

### A.1 テンソル代数

実ベクトル  $u, v \in \mathbb{R}^d$  に対して, テンソル積  $u \otimes v$  は, 双対ベクトル空間の元  $f, g$  に対して,

$$(A.1) \quad (u \otimes v)(f, g) \mapsto \langle u, f \rangle \langle v, g \rangle \in \mathbb{R}$$

なる実数を与える双線形写像である. ここで,  $\langle \bullet, \bullet \rangle$  は duality pairing である. 座標表示すると,  $u = (u_1, \dots, u_d)$ ,  $v = (v_1, \dots, v_d)$ ,  $f = (f^1, \dots, f^d)$  に対して,  $\langle u, f \rangle = \sum_i u_i f^i$  であり,  $u \otimes v \in \mathbb{R}^{d \times d}$  はランク 1 行列  $(u_i v_j)_{i,j=1, \dots, d}$  を成分として持つ. また, テンソル積  $\otimes$  の演算自体も双線形である. すなわち,

$$(A.2) \quad (au + bv) \otimes w = a(u \otimes w) + b(v \otimes w),$$

$$(A.3) \quad w \otimes (au + bv) = a(w \otimes u) + b(w \otimes v).$$

ここで,  $u, v, w \in \mathbb{R}^d$ ,  $a, b \in \mathbb{R}$ . なお, テンソル積  $u \otimes v$  と  $v \otimes u$  とは一般に等しくない(可換でない).

ベクトル空間  $\mathbb{R}^d$  の基底を  $\{e_1, \dots, e_d\}$  とし, テンソル積で  $n$  個のベクトルのテンソル積の線形結合の全体 ( $n$  階テンソルともいう) を  $(\mathbb{R}^d)^{\otimes n}$  と書く. すなわち,

$$(A.4) \quad (\mathbb{R}^d)^{\otimes n} = \left\{ \sum_{i_1, \dots, i_n=1, \dots, d} g^{(i_1 \dots i_n)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_n} \mid g^{(i_1 \dots i_n)} \in \mathbb{R} \right\}$$

さらに,  $k = 0, 1, \dots, n$  階のテンソルの直和

$$(A.5) \quad T^n(\mathbb{R}^d) := \bigoplus_{k=0}^n (\mathbb{R}^d)^{\otimes k} = \left\{ \sum_{k=0}^n \sum_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d} g^{(i_1 \dots i_k)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k} \mid g^{(i_1 \dots i_k)} \in \mathbb{R} \right\}$$

をテンソル代数という.

### A.2 テンソル代数における積

テンソル代数の元には和と非可換な乗算が定義されるので, 非可換多項式からなる代数とみることができる. すなわち, ベクトルに対するテンソル積を自然に拡張して, 積を

$$(A.6) \quad \begin{aligned} & (g^{(i_1 \dots i_k)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k}) \otimes (h^{(j_1 \dots j_l)} e_{j_1} \otimes \dots \otimes e_{j_l}) \\ &= g^{(i_1 \dots i_k)} h^{(j_1 \dots j_l)} e_{i_1} \otimes \dots \otimes e_{i_k} \otimes e_{j_1} \otimes \dots \otimes e_{j_l} \end{aligned}$$

と定義する.  $k$  階テンソルと  $l$  階テンソルとのテンソル積は  $k+l$  階テンソルになる. このテンソル積はテンソル代数の元に双線型に拡張される. 例えば,  $g, h \in T^2(\mathbb{R}^d)$  のテンソル積は,  $T^2(\mathbb{R}^d)$  内では以下のように算定される.

$$(A.7) \quad \begin{aligned} & \left( g^{(0)} + \sum_{i_1=1, \dots, d} g^{(i_1)} e_{i_1} + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, d} g^{(i_1 i_2)} e_{i_1} \otimes e_{i_2} \right) \\ & \otimes \left( h^{(0)} + \sum_{i_1=1, \dots, d} h^{(i_1)} e_{i_1} + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, d} h^{(i_1 i_2)} e_{i_1} \otimes e_{i_2} \right) \\ &= g^{(0)} h^{(0)} + \sum_{i_1=1, \dots, d} (g^{(0)} h^{(i_1)} + g^{(i_1)} h^{(0)}) e_{i_1} \\ & \quad + \sum_{i_1, i_2=1, \dots, d} (g^{(0)} h^{(i_1 i_2)} + g^{(i_1)} h^{(i_2)} + g^{(i_1 i_2)} h^{(0)}) e_{i_1} \otimes e_{i_2}. \end{aligned}$$

3階以上のテンソルは切り捨てられていることに注意.

### A.3 シグネチャのテンソル表記

以上の定義より, 反復積分を次のように簡潔に表記できる.

$$\begin{aligned}
 (A.8) \quad \sum_{i_1 \cdots i_n} \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_n)}(X) e_{i_1 \cdots i_n} &= \sum_{i_1 \cdots i_n} \int_0^1 \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{n-1}} dX_{t_1}^{(i_1)} \cdots dX_{t_{n-1}}^{(i_{n-1})} dX_{t_n}^{(i_n)} e_{i_1 \cdots i_{n-1} i_n} \\
 &= \sum_{i_1 \cdots i_n} \int_0^1 \int_0^{t_1} \cdots \int_0^{t_{n-1}} dX_{t_1}^{(i_1)} e_{i_1} \cdots dX_{t_{n-1}}^{(i_{n-1})} e_{i_{n-1}} dX_{t_n}^{(i_n)} e_{i_n} \\
 &= \int_{0 < t_1 < \cdots < t_n < 1} dX_{t_1} \otimes \cdots \otimes dX_{t_n}.
 \end{aligned}$$

ここで,  $(\mathbb{R}^d)^{\otimes n}$  の基底を簡単のため  $e_{i_1 \cdots i_n} := e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_n}$  と書いた. シグネチャは反復積分の直和なので, 次のように書ける.

$$\begin{aligned}
 (A.9) \quad \mathcal{S}_n(X) &= \sum_{k=0}^n \sum_{i_1 \cdots i_k} \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_k)}(X) e_{i_1 \cdots i_k} \\
 &= \sum_{k=0}^n \int_{0 < t_1 < \cdots < t_k < 1} dX_{t_1} \otimes \cdots \otimes dX_{t_k} \in T^n(\mathbb{R}^d).
 \end{aligned}$$

### A.4 テンソル代数のノルム

$g = \sum_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d} g^{(i_1 \cdots i_k)} e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_k} \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes k}$  に対して,

$$(A.10) \quad |g|_{\otimes k} = \sqrt{\sum_{i_1, \dots, i_k=1, \dots, d} (g^{(i_1 \cdots i_k)})^2}$$

とノルムを定義すると,  $g \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes k}$ ,  $h \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes l}$  に対して,

$$(A.11) \quad |g \otimes h|_{\otimes k+l} = |g|_{\otimes k} |h|_{\otimes l}$$

が成り立つ (Chapter 7 of Friz and Victoir, 2010). さらに, ノルム (A.10) をもとに,  $g = g^0 + \cdots + g^n \in T^n(\mathbb{R}^d)$ ,  $g^k \in (\mathbb{R}^d)^{\otimes k}$  のノルムを

$$(A.12) \quad \|g\| = \max_{k=0, \dots, n} |g^k|_{\otimes k}$$

と定義することができる (Chapter 7 of Friz and Victoir, 2010).

### A.5 シグネチャの線形汎関数

$T^n(\mathbb{R}^d)$  の双対空間  $T^n(\mathbb{R}^d)^*$  の基底を  $e^{i_1 \cdots i_k}$  と書き, シグネチャの線形汎関数

$$(A.13) \quad w = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1 \cdots i_k} w_{i_1 \cdots i_k}(X) e^{i_1 \cdots i_k} \in T^n(\mathbb{R}^d)^*$$

をとる. これを, 演算規則  $\langle e_{i_1 i_2}, e^{j_1 j_2} \rangle = \delta_{i_1}^{j_1} \delta_{i_2}^{j_2}$  などに従って, シグネチャ (A.9) に双線形に作用させると,

$$(A.14) \quad \langle w, \mathcal{S}_n(X) \rangle = \sum_{k=0}^n \sum_{i_1 \cdots i_k} w_{i_1 \cdots i_k} \mathcal{S}^{(i_1 \cdots i_k)}(X) \in \mathbb{R}$$

というスカラーが得られる。これは経路の関数  $X \mapsto \langle w, \mathcal{S}_n(X) \rangle$  を定義している。

## 参 考 文 献

- Arribas, I. P., Goodwin, G. M., Geddes, J. R., Lyons, T. and Saunders, K. E. A. (2018). A signature-based machine learning model for distinguishing bipolar disorder and borderline personality disorder, *Translational Psychiatry*, **8**, 274, <http://dx.doi.org/10.1038/s41398-018-0334-0>.
- Baudoin, F. and Zhang, X. (2012). Taylor expansion for the solution of a stochastic differential equation driven by fractional Brownian motions, *Electronic Journal of Probability*, **17**, 1–21.
- Bishop, C. M. (2006). *Pattern Recognition and Machine Learning (Information Science and Statistics)*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg.
- Boedihardjo, H., Lyons, T. and Yang, D. (2015). Uniform factorial decay estimates for controlled differential equations, *Electronic Communications in Probability*, **20**(none), 1–11, <https://doi.org/10.1214/ECP.v20-4124>.
- Cardinali, C., Pezzulli, S. and Andersson, E. (2004). Influence-matrix diagnostic of a data assimilation system, *Quarterly Journal of the Royal Meteorological Society: A Journal of the Atmospheric Sciences, Applied Meteorology and Physical Oceanography*, **130**(603), 2767–2786.
- Chevyrev, I. and Kormilitzin, A. (2016). A primer on the signature method in machine learning, arXiv:1603.03788.
- Fermanian, A. (2021). Embedding and learning with signatures, *Computational Statistics and Data Analysis*, **157**, p. 107148, <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167947320302395>, <https://doi.org/10.1016/j.csda.2020.107148>.
- Friz, P. K. and Victoir, N. B. (2010). *Multidimensional Stochastic Processes as Rough Paths: Theory and Applications*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, Cambridge University Press, Cambridge, <http://dx.doi.org/10.1017/CBO9780511845079>.
- Google (2017). The quick, draw! dataset, <https://github.com/creativelab/quickdraw-dataset>, Data made available by Google, Inc. under the Creative Commons Attribution 4.0 International license.
- Gould, J., Roemmich, D., Wijffels, S., Freeland, H., Ignaszewsky, M., Jianping, X., Pouliquen, S., Desaubies, Y., Send, U., Radhakrishnan, K., Takeuchi, K., Kim, K., Danchenkov, M., Sutton, P., King, B., Owens, B. and Riser, S. (2004). Argo profiling floats bring new era of in situ ocean observations, *Eos, Transactions American Geophysical Union*, **85**(19), 185–191, <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2004EO190002>.
- Hambly, B. and Lyons, T. (2010). Uniqueness for the signature of a path of bounded variation and the reduced path group, *Annals of Mathematics*, **171**, 109–167.
- 原啓介 (2019). 『線形性・固有値・テンソル：線形代数応用への最短コース』, KS 理工学専門書, 講談社, 東京.
- Hastie, T., Tibshirani, R. and Friedman, J. (2009). *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference and Prediction*, 2nd ed., Springer, Berlin, Heidelberg, <http://www-stat.stanford.edu/~tibs/ElemStatLearn/>.
- Kiraly, F. J. and Oberhauser, H. (2019). Kernels for sequentially ordered data, *Journal of Machine Learning Research*, **20**(31), 1–45, <http://jmlr.org/papers/v20/16-314.html>.
- Kormilitzin, A. (2017). the-signature-method-in-machine-learning, <https://github.com/kormilitzin/>.
- Levin, D., Lyons, T. and Ni, H. (2013). Learning from the past, predicting the statistics for the future, learning an evolving system, arXiv:1309.0260.
- Li, C., Zhang, X., Liao, L., Jin, L. and Yang, W. (2019). Skeleton-based gesture recognition using several fully connected layers with path signature features and temporal transformer module, *Proceedings of the Thirty-third AAAI Conference on Artificial Intelligence and Thirty-*

- first Innovative Applications of Artificial Intelligence Conference and Ninth AAAI Symposium on Educational Advances in Artificial Intelligence*, AAAI Press, Palo Alto, California, USA, <https://doi.org/10.1609/aaai.v33i01.33018585>.
- Liao, S., Lyons, T., Yang, W. and Ni, H. (2019). Learning stochastic differential equations using RNN with log signature features, arXiv:1908.08286.
- Litterer, C. and Oberhauser, H. (2011). On a Chen–Fliess approximation for diffusion functionals, *Monatshefte für Mathematik*, **175**, 577–593.
- Lyons, T., Ni, H. and Oberhauser, H. (2014). A feature set for streams and an application to high-frequency financial tick data, *Proceedings of the 2014 International Conference on Big Data Science and Computing*, Association for Computing Machinery, New York, USA, <https://doi.org/10.1145/2640087.2644157>.
- Lyons, T. J. (1998). Differential equations driven by rough signals, *Revista Matemática Iberoamericana*, **14**(2), 215–310.
- Lyons, T. J., Caruana, M. and Lévy, T. (2007). *Differential Equations Driven by Rough Paths*, Lecture Notes in Mathematics, **1908**, Springer, Berlin, Heidelberg.
- Malekzadeh, M., Clegg, R. G., Cavallaro, A. and Haddadi, H. (2018). Protecting sensory data against sensitive inferences, *Proceedings of the 1st Workshop on Privacy by Design in Distributed Systems*, 1–6.
- Mehta, P., Bukov, M., Wang, C.-H., Day, A. G., Richardson, C., Fisher, C. K. and Schwab, D. J. (2019). A high-bias, low-variance introduction to machine learning for physicists, *Physics Reports*, **810**, 1–124.
- Moore, P. J., Lyons, T. J. and Gallacher, J. (2019). Using path signatures to predict a diagnosis of Alzheimer’s disease, *PLOS ONE*, **14**(9), e0222212, <http://dx.doi.org/10.1371/journal.pone.0222212>.
- Morrill, J., Kormilitzin, A., Nevado-Holgado, A., Swaminathan, S., Howison, S. and Lyons, T. (2019). The Signature-based model for early detection of sepsis from electronic health records in the intensive care unit, *2019 Computing in Cardiology (CinC)*, 1–4, <http://dx.doi.org/10.23919/CinC49843.2019.9005805>.
- Plackett, R. L. (1949). A historical note on the method of least squares, *Biometrika*, **36**(3-4), 458–460, <https://doi.org/10.1093/biomet/36.3-4.458>.
- Reizenstein, J. F. and Graham, B. (2020). Algorithm 1004: The iisignature library: Efficient calculation of iterated-integral signatures and log signatures, *ACM Transactions on Mathematical Software*, **46**(1), <http://dx.doi.org/10.1145/3371237>.
- Salamon, J., Jacoby, C. and Bello, J. P. (2014). A dataset and taxonomy for urban sound research, *Proceedings of the 22nd ACM International Conference on Multimedia*, 1041–1044.
- Stone, M. H. (1937). Applications of the theory of Boolean rings to general topology, *Transactions of the American Mathematical Society*, **41**(3), 375–481.
- Sugiura, N. and Hosoda, S. (2020). Machine learning technique using the signature method for automated quality control of argo profiles, *Earth and Space Science*, **7**(9), p. e2019EA001019, <https://agupubs.onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1029/2019EA001019>.
- Sugiura, N. and Kouketsu, S. (2021). Simple El Niño prediction scheme using the signature of climate time series, arXiv:2109.02013.
- Tibshirani, R. (1996). Regression shrinkage and selection via the Lasso, *Journal of the Royal Statistical Society. Series B (Methodological)*, **58**(1), 267–288, <http://www.jstor.org/stable/2346178>.
- Xie, Z., Sun, Z., Jin, L., Ni, H. and Lyons, T. (2018). Learning spatial-semantic context with fully convolutional recurrent network for online handwritten Chinese text recognition, *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **40**(8), 1903–1917, <http://dx.doi.org/10.1109/TPAMI.2017.2732978>.

## Introduction to the Signature Method

Nozomi Sugiura

Global Ocean Observation Research Center,  
Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology

Sequential data observed in Earth Science can be regarded as paths in multidimensional space. Instead of seeing a path as a mere series of vectors, it is useful to convert it into a sequence of numbers called the signature of a path. The signature can faithfully describe the order of points and the nonlinearity between dimensions contained in a path. As a result, any nonlinear function defined on a set of paths can be approximated by a linear combination of terms in the signature of each path in it. Hence, when learning a set of sequential data with labels attached, linear regression can be applied to the signature-label pairs, yielding state-of-the-art results even when the labels are determined by a nonlinear function. Incorporating the signature methods into Machine Learning and Data Assimilation utilizing sequential data should allow us to extract information that has previously been overlooked.