

第4章 直交行列とスペクトル分解

4.1 直交行列

【定義 4.1】 正規直交ベクトル $\{q_i \in R^n\}_{i=1}^n$ を列 (行) ベクトルとする行列

$$Q = (q_1 | q_2 | \dots | q_n) \quad (Q = \begin{pmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_n^T \end{pmatrix})$$

を直交行列 (orthogonal matrix) という。

【定理 4.1 直交行列の逆行列】 $Q^{-1} = Q^T$

【定理 4.2 直交行列の性質】 $n \times n$ 直交行列 Q は,

- (1) $\|Qx\| = \|x\|$ for all $x \in R^n$.
- (2) $(Qx)^T Qy = x^T y$ for all $x, y \in R^n$.
- (3) $|\det Q| = 1$.
- (4) 固有値の大きさは全て 1 である.

を満たす.

【定理 4.1 の証明】 $Q = (q_1 | q_2 | \dots | q_n)$ とすれば, 直ちに

$$Q^T Q = \begin{pmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_n^T \end{pmatrix} (q_1 | q_2 | \dots | q_n) = \begin{pmatrix} q_1^T q_1 & q_1^T q_2 & \dots & q_1^T q_n \\ q_2^T q_1 & q_2^T q_2 & \dots & q_2^T q_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_n^T q_1 & q_n^T q_2 & \dots & q_n^T q_n \end{pmatrix} = I.$$

また,

$$QQ^T = (q_1|q_2|\dots|q_n) \begin{pmatrix} q_1^T \\ q_2^T \\ \vdots \\ q_n^T \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n q_i q_i^T$$

から, 標準基 $\{e_i\}_{i=1}^n$ との積は, いずれも

$$QQ^T e_j = \sum_{i=1}^n q_i q_i^T e_j = \sum_{i=1}^n (q_i^T e_j) q_i = e_j$$

となる. したがって, $QQ^T(e_1|\dots|e_n) = QQ^T = I$. ■

4.2 スペクトル分解

【定義 4.2】 全ての成分が実数である正方行列 A が, $A = A^T$ を満足するならば, A を**実対称行列 (real symmetric matrix)** という.

実行列の範囲で複素固有値をもつ行列および対角化不可能な行列は, 必ず非対称な帯行列と相似 (線形共役) となる. 従って, 実対称行列はこれらとは相似となりえず, 必ず実固有値のみを持ち, 対角化が可能となると直感的に理解できるであろう.

【命題 4.1 実対称行列の固有値】 実対称行列 A の固有値は実数に限られる.

【命題 4.2 実対称行列の固有ベクトル】 実対称行列 A の相異なる固有値の固有ベクトルは直交する.

【命題 4.1 の証明】 A の固有値および固有ベクトルを $\sigma \pm i\omega$ および $u \pm iv$ とする. 但し, $\sigma, \omega \in R^1$ および $u, v \in R^n$ とする. この時,

$$A(u \pm iv) = (\sigma \pm i\omega)(u \pm iv)$$

より, 実数部と虚部に分解し, $Au = \sigma u - \omega v$, $Av = \omega u + \sigma v$ をえる. 2式それぞれに v および u との内積を計算すると,

$$v^T Au = \sigma v^T u - \omega \|v\|^2, \quad u^T Av = \omega \|u\|^2 + \sigma u^T v.$$

他方, $(v^T Au)^T = u^T A^T v = u^T Av$ より, $\sigma v^T u - \omega \|v\|^2 = \omega \|u\|^2 + \sigma u^T v$.

したがって, $\omega(\|v\|^2 + \|u\|^2) = 0$ から, $\omega = 0$. ■

【命題 4.2 の証明】 $\lambda_i \neq \lambda_j$ を固有値とし, q_i および q_j を対応する固有ベクトルとすると,

$$Aq_i = \lambda_i q_i, \quad Aq_j = \lambda_j q_j.$$

2式それぞれに u_j および u_i との内積を計算すると, $q_j^T Aq_i = \lambda_i q_j^T q_i$, $q_i^T Aq_j = \lambda_j q_i^T q_j$.

他方, $(q_j^T Aq_i)^T = q_i^T A^T q_j = q_i^T Aq_j$ より, $\lambda_j q_i^T q_j = \lambda_i q_i^T q_j$. したがって, $(\lambda_j - \lambda_i)q_i^T q_j = 0$ から, $q_i^T q_j = 0$. ■

【補題 4.1 正方行列の上三角化可能性】 実固有値のみを持つ $n \times n$ 実正方行列 A は、適当な直交行列 Q と上三角行列 R によって、 $A = Q^T R Q$ へ分解される。

【定理 4.3 スペクトル分解】 $n \times n$ 実対称行列 A は直交行列によって対角化される。すなわち、固有値 $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ および固有ベクトル $\{q_i\}_{i=1}^n$ を用いて、

$$A = \lambda_1 q_1 q_1^T + \lambda_2 q_2 q_2^T + \dots + \lambda_n q_n q_n^T$$

でスペクトル分解 (spectral decomposition) できる。

【補題 4.1 の証明】 1×1 行列の場合、自明である。

$n-1 \times n-1$ 行列のとき、 $A_{n-1} = Q_{n-1}^T R_{n-1} Q_{n-1}$ であることを仮定して、 $n \times n$ 行列の場合を示す。まず、 A からある固有値 $\lambda \in \mathbb{R}^1$ と正規化された固有ベクトル $q_1 \in \mathbb{R}^n$ を選択し、グラム・シュミット直交化によって適当な基底 $\{q_i\}_{i=1}^n$ を構成する。これによって、

$$A(q_1 | q_2 | \dots | q_n) = (\lambda q_1 | A q_2 | \dots | A q_n)$$

となり、その右辺は、

$$\begin{aligned} (\lambda q_1 | A q_2 | \dots | A q_n) &= I(\lambda q_1 | A q_2 | \dots | A q_n) \\ &= (q_1 | q_2 | \dots | q_n) \begin{pmatrix} \frac{q_1^T}{q_1^T} \\ \frac{q_2^T}{q_2^T} \\ \vdots \\ \frac{q_n^T}{q_n^T} \end{pmatrix} (\lambda q_1 | A q_2 | \dots | A q_n) \\ &= (q_1 | q_2 | \dots | q_n) \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & A_{n-1} \end{array} \right). \end{aligned}$$

したがって、 $Q^T = (q_1 | q_2 | \dots | q_n)$ として、

$$A Q^T = Q^T \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & A_{n-1} \end{array} \right).$$

さらに、

$$\begin{aligned} A Q^T \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T \end{array} \right) &= Q^T \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T R_{n-1} Q_{n-1} \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T \end{array} \right) \\ &= Q^T \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T R_{n-1} \end{array} \right) \\ &= Q^T \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T \end{array} \right)^T \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T R_{n-1} \end{array} \right) \\ &= Q^T \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & R_{n-1} \end{array} \right) \end{aligned}$$

と変形し、

$$Q_n^T = Q^T \left(\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline 0 & Q_{n-1}^T \end{array} \right)$$

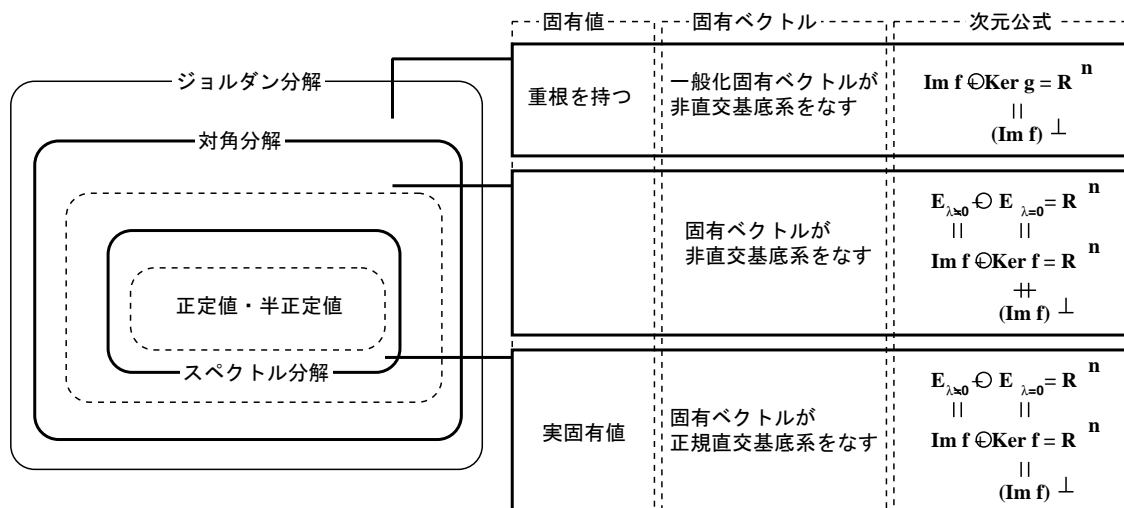


図 4.1: 実正方行列に関する分解のまとめ

と置き換えると,

$$AQ_n^T = Q_n \left(\begin{array}{c|c} \lambda & * \\ \hline 0 & R_{n-1} \end{array} \right) = Q_n^T R_n. \blacksquare$$

【定理 4.3 の証明】 命題 4.1 および補題 4.1 から, $A = Q^T R Q$ となるが, 対称性から

$$A = Q^T R Q = A^T = Q^T R^T Q$$

となる. 上三角行列が $R = R^T$ を満足する場合, R は対角行列となる. \blacksquare

4.3 情報処理への展開

4.3.1 直交変換と画像情報圧縮

ベクトル量子化 (1.4.2 参照) は, ノルム空間における情報圧縮原理であったが, ここでは内積空間における情報圧縮原理を考えてみよう.

スカラー量子化 (scalar quantization) 1画素当たり 1[byte] の明るさをもつ濃淡画像を $\{a_i\}_{i=1}^D$ とする. 仮に, 各成分に整数精度での割算 ($[\cdot]$ はガウス記号) $[\frac{a_i}{\eta}]$ を施し, 一つの成分に $(8 - \log_2 \eta)[\text{bit}]$ を割りあてると, ファイルサイズは, $(1 - \frac{\log_2 \eta}{8})n[\text{byte}]$ へ減少する. この時, 復元される画像は $\{\eta[\frac{a_i}{\eta}]\}_{i=1}^D$ であるから, 2乗誤差を用いて $\sum_{i=1}^D |a_i - \eta[\frac{a_i}{\eta}]|^2$ だけ誤差を持つことに注意する. この処理を **スカラー量子化 (scalar quantization)** という.

直交変換符号化 (orthogonal transform coding) 直交変換符号化とは, 画像にスカラー量子化を直接適用せず, 適当な直交行列を施した後にスカラー量子化を適用する手法である. (図 4.2 参照) まず, 画像を $m \times m$ 画素からなるブロックに分割し, その各々を m^2 次元ベクトル x で表す. 仮に, ある直交行列 Q によって,

$$y = Qx = (b_1, b_2, \dots, b_{m^2})^T$$

なる座標変換を行うと成分が降順

$$b_1 > b_2 > b_3 > \dots > b_{m^2}$$

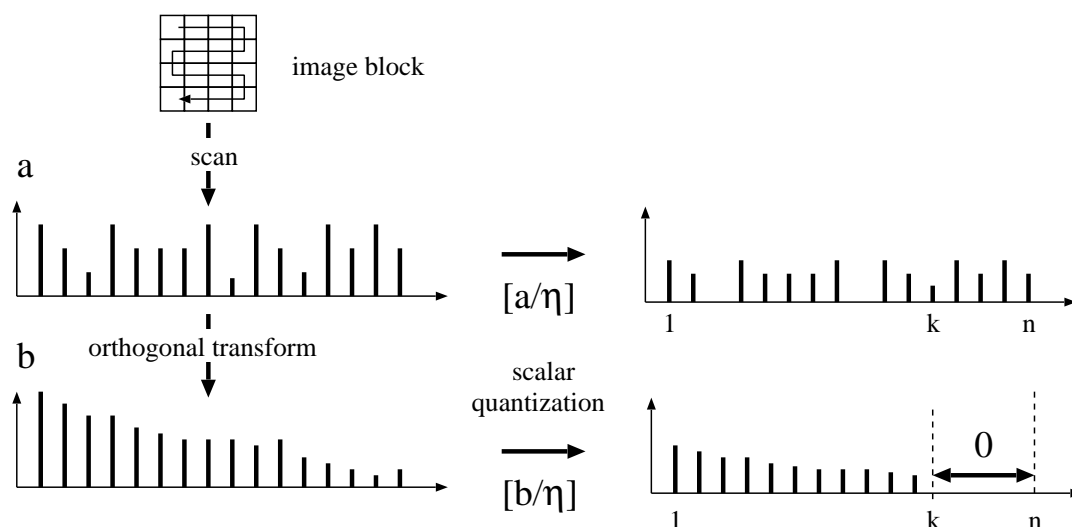


図 4.2: 直交変換による画像情報圧縮の概念

となるとしよう．これをスカラー量子化すると，

$$\left[\frac{b_1}{\eta}\right] > \left[\frac{b_2}{\eta}\right] > \dots > \left[\frac{b_k}{\eta}\right] = \dots = \left[\frac{b_n}{\eta}\right] = 0$$

となり，零成分は列の後方に集中して現れる．よって， k ($k < m^2$) の情報を付加することで，零成分に関する情報を削除することができる．他方，スカラー量子化においては，どこに零成分が現れるかが定まらないため，零成分に関する情報もファイルに確保する必要がある．よって，

$$\left(1 - \frac{\log_2 \eta}{8}\right) k [\text{byte}] < \left(1 - \frac{\log_2 \eta}{8}\right) m^2 [\text{byte}]$$

より，ファイルサイズをさらに小さくできる．ここで注意すべきことは，復元される画像の歪み

$$x' = Q^T y' = Q^T \left(\eta \left[\frac{b_1}{\eta} \right], \left[\frac{b_2}{\eta} \right], \dots, \left[\frac{b_{m^2}}{\eta} \right] \right)^T$$

である．直交行列 Q はベクトル x の長さを不変にするため， y をスカラー量子化した場合も， x をスカラー量子化した場合も 2 乗誤差には変わりがないことに注意する．このように成分を降順に並べ換える直交行列¹の原理と構成法に関しては，6.2 および 6.3 を参照して欲しい．

画像情報圧縮における種々の歪み スカラー量子化によって圧縮された画像では，滑らかに変化していた明るさが階段状に不連続変化し，等高線のような**疑似輪郭 (pseudo contour)**が生じる．他方，画像をブロック分割して処理するベクトル量子化あるいは直交変換符号化においては，ブロック境界付近の歪みが目立つ**ブロックノイズ (block noise)**が生じる．加えて，直交変換符号化においては，変換後に成分値が小さい高周波数成分が削除されるためにブロック全体に**モスキートノイズ (mosquito noise)**と呼ばれる細かな歪みが生じる．

4.3.2 重複直交変換と音響信号圧縮

音響信号圧縮と窓関数 CD に用いられる PCM フォーマットのデジタル音響信号を ADPCM フォーマットによって歪み圧縮した場合，16 [bit/sample] のデータは 12 [bit/sample] 程度となる．これに対して，

¹ JPEG では，DCT (Discrete Cosine Transform, 離散コサイン変換) なる直交変換が利用されている．

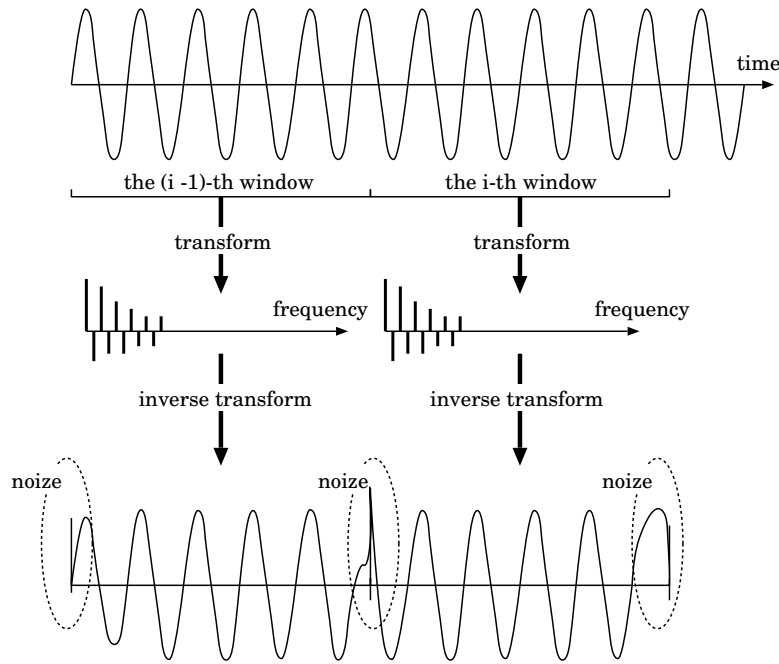


図 4.3: 音響信号圧縮における窓単位処理の注意

MP3, OGG Vorbis, Twin-VQ 等の歪み圧縮方式は、直交変換（周波数変換）符号化を用いることで 1.6[bit/sample] 程度までデータ量を削減している。ただし、音響信号においては、ブロックノイズは必ず一定周期で発生するため、それがいかにか小さくとも聴覚的に致命的な雑音となる。(図 4.3) このため、単純に信号を窓分割し、直交変換符号化を適用することは許されない。そこで、前後の窓で再構成された 2 つの信号を滑らかに接合するために、窓関数 (**window function**) が用いられている。

まず、図 4.4 のように、その半数が前後で重なるように幅 $2n$ の窓を設定する。次に、

$$f(0) = f(2n-1) = 0, \quad f(i)^2 + f(2n-1-i)^2 = 1$$

を満たす山型の微分可能関数

$$f : [0, 2n-1] \rightarrow [0, 1]$$

を窓関数として与え、対角行列

$$\Omega = \text{diag}(f(0), f(1), \dots, f(2n-1))$$

によって、第 $i-1$ および第 i 窓の信号ベクトル

$$W_{i-1} = \begin{pmatrix} w_{i-1} \\ w_i \end{pmatrix} \in R^{2n}, \quad W_i = \begin{pmatrix} w_i \\ w_{i+1} \end{pmatrix} \in R^{2n}$$

の各成分に重みをつける。これにより、 ΩW_{i-1} は、窓の両端へ向かって成分が徐々に零となり、前後の信号がいかなるものであっても滑らかに接合できる。これに対して、適切な $2n \times 2n$ 直交行列 Q によって、周波数成分

$$\alpha_{i-1} = Q \Omega W_{i-1} \in R^{2n}, \quad \alpha_i = Q \Omega W_i \in R^{2n}$$

が得られる。同様に、ベクトルあるいはスカラー量子化等によって情報を減ぜられた周波数成分から信号ベクトル w_i を復元する場合も、

$$\begin{pmatrix} \bar{y}_{i-1} \\ y_i \end{pmatrix} = \Omega Q^T \alpha_{i-1}, \quad \begin{pmatrix} \bar{y}_i \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \Omega Q^T \alpha_i$$

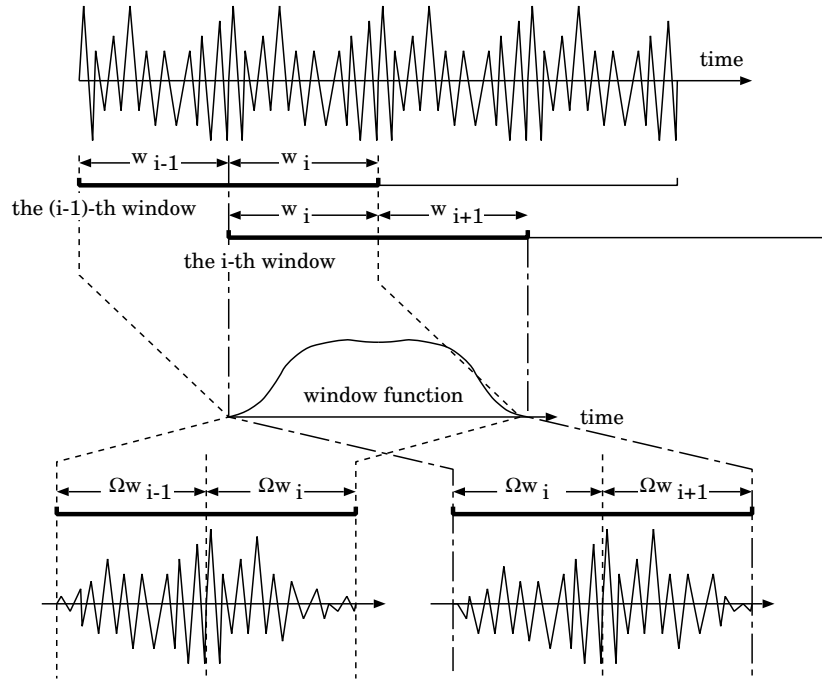


図 4.4: 窓関数と重複直交変換の概念

のように逆変換し、窓関数を施した後、前後の信号ベクトル y_i および \bar{y}_i を足し合わせる必要がある。

重複直交変換の原理 上記の方法では、窓幅の半分を重ねた直交変換によって周波数成分数が倍増し、情報圧縮とならないことに注意する。この問題に関して、窓幅 $2n$ の半分の n 個に周波数成分で、信号を再構成できる**重複直交変換 (overlapped orthogonal transform)** が知られている。ここでは、その原理²を調べてみる。

まず、2つの $n \times n$ 行列 A と B を用いて、 $n \times 2n$ 行列 $(A|B)$ を作用素とする変換

$$f: \begin{pmatrix} w_{i-1} \\ w_i \end{pmatrix} \in R^{2n} \mapsto \alpha_{i-1} = (A|B) \begin{pmatrix} w_{i-1} \\ w_i \end{pmatrix} \in R^n,$$

$$f: \begin{pmatrix} w_i \\ w_{i+1} \end{pmatrix} \in R^{2n} \mapsto \alpha_i = (A|B) \begin{pmatrix} w_i \\ w_{i+1} \end{pmatrix} \in R^n$$

を考える。ここで、周波数成分の数は対象となる信号ベクトルの次元 $2n$ の半分の n となることに注意する。これに転置 $(A|B)^T$ を施すと、

$$\begin{pmatrix} \bar{y}_{i-1} \\ y_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T \\ B^T \end{pmatrix} \alpha_{i-1} = \begin{pmatrix} A^T \\ B^T \end{pmatrix} (A|B) \begin{pmatrix} w_{i-1} \\ w_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T A & A^T B \\ B^T A & B^T B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_{i-1} \\ w_i \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} \bar{y}_i \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T \\ B^T \end{pmatrix} \alpha_i = \begin{pmatrix} A^T \\ B^T \end{pmatrix} (A|B) \begin{pmatrix} w_i \\ w_{i+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^T A & A^T B \\ B^T A & B^T B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_i \\ w_{i+1} \end{pmatrix}.$$

したがって、前半と後半の合計

$$y_i + \bar{y}_i = B^T A w_{i-1} + B^T B w_i + A^T A w_i + A^T B w_{i+1} = B^T A w_{i-1} + (A^T A + B^T B) w_i + A^T B w_{i+1}$$

² ここでは、窓関数 Ω の適用を省いて説明する。

が, w_{i-1} および w_{i+1} に依存せず恒等的に w_i に等しくなるためには,

$$A^T A + B^T B = I, \quad A^T B = B^T A = 0 \quad (4.1)$$

が成立すれば良い.

さらに (4.1) を詳しく調べてみよう. $A^T B = 0$ から, A のすべての列ベクトルと B のすべての列ベクトルが直交することに注意する. 問題 3.3 から $\text{rank} A + \text{rank} B \leq n$ となり, 処理の空間対称性から A と B のランクが等しいと仮定すると, 最大で $\text{rank} A = \text{rank} B = \frac{n}{2}$ となる. よって, A および B の列ベクトルで張られる各々の部分空間 $X(A)$ および $X(B)$ は,

$$R^n = X(A) \oplus X(B), \quad \dim X(A) = \dim X(B) = n/2 = m$$

を満たし, 相互に直交補空間となる. 以上から, 重複直交変換の窓幅は, 必ず $4m$ でなければならず, 図 4.5 のように第 $i-1$ 窓における信号成分 $W_i \in R^n$ は, m 次元部分空間 $X(B)$ へ射影され, m 個の成分が $\alpha_{i-1} \in R^n$ に隠される. 同様に, 第 i 窓における信号成分 $W_i \in R^n$ は, m 次元直交補空間 $X(A)$ へ射影され, $\alpha_i \in R^n$ に隠されることになる. ここで, α_{i-1} および α_i に隠された異なる信号ベクトルの成分は, 部分空間の直交性によって完全に分離できることに注目したい.

重複直交変換の導出 上記の考察から, $X(A)$ および $X(B)$ の正規直交基底系を $\{q_i\}_{i=1}^m$ および $\{p_i\}_{i=1}^m$ とし, これらに線形従属な同数のベクトルを $\{\sum_{i=1}^m s_{i,j} q_i\}_{j=1}^m$ および $\{\sum_{i=1}^m t_{i,j} p_i\}_{j=1}^m$ とする. ここで, $n \times m$ 行列 $Q = (q_{i,j})$ および $P = (p_{i,j})$ と $m \times m$ 行列 $S = (s_{i,j})$ および $T = (t_{i,j})$ を用いて, $n \times n$ 行列

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}}(Q|QS), \quad B = \frac{1}{\sqrt{2}}(P|PT)$$

を定義する. 第一に $Q^T P = P^T Q = 0$ から, S および T に依存せず,

$$2A^T B = \left(\begin{array}{c|c} Q^T & Q^T QS \\ \hline S^T Q^T & S^T QS^T QS \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} P & PT \\ \hline & \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} Q^T P & Q^T PT \\ \hline S^T Q^T P & S^T Q^T PT \end{array} \right) = 0_{n \times n}.$$

第二に, $Q^T Q = P^T P = I$ から,

$$2A^T A + 2B^T B = \left(\begin{array}{c|c} Q^T & Q^T QS \\ \hline S^T Q^T & S^T QS^T QS \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} Q & QS \\ \hline & \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c|c} P^T & P^T PT \\ \hline T^T P^T & T^T P^T PT \end{array} \right) \left(\begin{array}{c|c} P & PT \\ \hline & \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c|c} 2I_{m \times m} & S+T \\ \hline S^T + T^T & S^T S + T^T T \end{array} \right) = 2I$$

となり, $S+T=0$ および $S^T S + T^T T = 2I$ が必要条件となる. これを解くと係数行列が, $S = -T$ を満たす直交行列であれば, 重複直交変換³

$$f: w \in R^{2n} \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}}(Q|QS|P| -PS)w \in R^n$$

が得られることになる.

³ この例として修正離散コサイン変換 (Modified Discrete Cosine Transform) があり, MP3 等の様々な音響信号圧縮方式に用いられている.

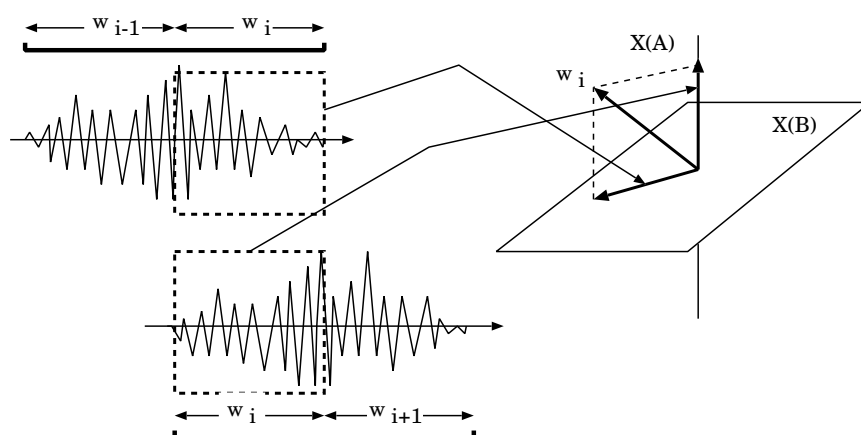


図 4.5: 重複直交変換による音響信号圧縮の概念

章末問題

【問題 4.1 直交行列】定理 4.2 を証明せよ。(ヒント: 直交行列 Q が, 複素固有値 $\sigma \pm i\omega$ と複素固有ベクトル $u \pm iv$ を持つと仮定して, $\sigma^2 + \omega^2 = 1$ を示せばよい.)

【問題 4.2 QR 分解】任意の実正方行列 A は, 上三角行列 R と直交行列 Q により, $A = QR$ で表現できることを示せ.

【問題 4.3 直交行列】 2×2 直交行列は, $\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$ か $\begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}$ に限られることを示せ.

【問題 4.4 行列の中乗】 $n \times n$ 実対称行列 A が, $A = \lambda_1 q_1 q_1^T + \dots + \lambda_n q_n q_n^T$ でスペクトル分解されるとき, A^k を求めよ.

【問題 4.5 スペクトル分解】行列 $A = \begin{pmatrix} 7 & 4 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}$ をスペクトル分解せよ. また, A^k を求めよ.

【問題 4.6 対角化の再考察】 $n \times n$ 実行列 A は, 実固有値のみを持ち, かつ対角化可能であるとする. 仮に, 固有値 $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ に対する固有ベクトル $\{u_i\}_{i=1}^n$ として, スペクトル分解と類似した形式

$$A = \lambda_1 u_1 v_1^T + \dots + \lambda_n u_n v_n^T$$

を考えると次々の設問に答えよ.

(1) $\{v_i\}_{i=1}^n$ と固有ベクトルはいかなる関係にあるか答えよ.

(2) A^n を求めよ.

【問題 4.7 重複直交変換】線形変換

$$f: x \in R^4 \mapsto \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\cos \theta & -\sin \theta & -\sin \theta \\ -\sin \theta & \sin \theta & -\cos \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} x \in R^2$$

は、窓幅4の重複直交変換となることを示せ。(ヒント:

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \\ d \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \end{pmatrix} = f \begin{pmatrix} c \\ d \\ e \\ f \end{pmatrix}$$

を逆変換することで、 c と d を復元できることを示せ.)