第 6 章　スペクトル分解の応用

6.1　K-L 変換

4.3.1 において，ブロック分割された画像デ− タを n 次元実ベクトルの集合 $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^D$ で表現し，個々に適当な直交行列 Q を施すことで効率的に情報圧縮ができることを説明した．例えば，変換後のベクトル Qx_i の上位 k 成分以外を零とするスカラ− 量子化

$$F \;:\; x_i \in R^n \mapsto \Gamma_k Q x_i = \left(\begin{array}{c|c} I_{k\times k} & 0_{k\times(n-k)} \\ \hline 0_{(n-k)\times k} & 0_{(n-k)\times(n-k)} \end{array}\right) Q x_i \in R^n$$

を行うことで，n 次元ベクトルの集合は，より小さな k 次元ベクトルの集合へ変換できる．このとき，復元された画像は，

$$U_k = \sum_{i=1}^{D} \| \, x_i - Q^T \Gamma_k Q x_i \, \|^2$$

だけの 2 乗誤差を持つことに注意する．すなわち，最も効率の良い直交行列 Q とは，任意の $k \in \{1, 2, \ldots, n\}$ において，U_k を最小化するものと考えられる．

【定義 6.1 】ベクトル集合 $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^D$ による対称行列

$$C = (x_1|x_2|\ldots|x_D) \left(\begin{array}{c} x_1^T \\ \hline \vdots \\ \hline x_D^T \end{array}\right) = \sum_{i=1}^{D} x_i x_i^T$$

を**共分散行列 (covariance matrix)**[1] という．

【定義 6.2 】共分散行列 C の正規直交固有ベクトルを $\{q_i\}_{i=1}^n$ とする．ただし，対応する固有値はその大きさの順に並んでいるとする．これによる等長変換

$$f : x \in R^n \mapsto \left(\begin{array}{c} q_1^T \\ \hline \vdots \\ \hline q_n^T \end{array}\right) x \in R^n$$

を *Karhunen-Loéve*（*K-L*）**変換 (Karhunen-Loéve transform)** [2] という．

---

[1] 分散共分散行列ともいわれる．
[2] ここでは，ユークリッド空間において K-L 変換を定義するが，K-L 変換は，一般にヒルベルト空間（関数空間）において定義される．詳細は，関数解析に譲る．

【補題 6.1 誤差関数の導出 】 すべての $k \in \{1,2,\ldots,n\}$ で 2 乗誤差 U_k を最小とする直交行列 Q は，

$$u_k = \sum_{i=1}^{D} x_i^T Q^T \Gamma_k Q x_i$$

を最大とする．

【補題 6.2 誤差関数の計算】 直交行列を $Q = \begin{pmatrix} p_1^T \\ \hline \vdots \\ \hline p_n^T \end{pmatrix}$ とすると，

$$u_k = \sum_{i=1}^{D} x_i^T Q^T \Gamma_k Q x_i = \sum_{j=1}^{k} p_j^T (\sum_{i=1}^{D} x_i x_i^T) p_j.$$

【定理 6.1 *K-L* **変換 】** すべての $k \in \{1,2,\ldots,n\}$ で 2 乗誤差 U_k を最小とする直交行列 Q の第 i 行ベクトルは，*K-L* 変換行列の第 i 行ベクトルと平行である．

【証明】補題 6.1 および補題 6.2 から，U_k を最小化する Q は，

$$u_k = \sum_{j=1}^{k} p_j^T (\sum_{i=1}^{D} x_i x_i^T) p_j$$

を最大とする Q である．行列 $\sum_{i=1}^{D} x_i x_i^T$ は，対称かつ半正定値であるため，その固有値を

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_n \geq 0$$

とする．λ_i に対応する固有ベクトルを q_i として，スペクトル分解すると，

$$\sum_{i=1}^{D} x_i x_i^T = \lambda_1 q_1 q_1^T + \ldots + \lambda_n q_n q_n^T.$$

これを，u_k に代入して，

$$u_k = \sum_{j=1}^{k} p_j^T (\lambda_1 q_1 q_1^T + \ldots + \lambda_n q_n q_n^T) p_j = \sum_{j=1}^{k} \lambda_1 |p_j^T q_1|^2 + \ldots + \lambda_n |p_j^T q_n|^2.$$

$k = 1$ のとき，正規性 $\sum_{i=1}^{n} |q_1^T p_i|^2 = 1$ に注意すると，

$$u_1 = \lambda_1 |p_1^T q_1|^2 + \ldots + \lambda_n |p_1^T q_n|^2 = \lambda_1 - (\lambda_1 - \lambda_2)|p_1^T q_2|^2 - \ldots - (\lambda_1 - \lambda_n)|p_1^T q_n|^2$$

から，$p_1^T q_i = \delta_{1,i}$ のとき，u_1 は最大値 λ_1 をとる．よって，$p_1 \parallel q_1$.
同様に，$k = 2$ のとき，直交性 $p_1^T q_2 = 0$ と正規性 $\sum_{i=1}^{n} |p_2^T q_i|^2 = \sum_{i=2}^{n} |p_2^T q_i|^2 = 1$ に注意すると，

$$u_2 = \lambda_1 + \lambda_2 |p_2^T q_2|^2 + \ldots + \lambda_n |p_2^T q_n|^2 = \lambda_1 + \lambda_2 - (\lambda_2 - \lambda_3)|p_2^T q_3|^2 - \ldots - (\lambda_2 - \lambda_n)|p_2^T q_n|^2$$

より，$p_2^T q_i = \delta_{2,i}$ のとき，u_2 は最大値 $\lambda_1 + \lambda_2$ をとる．よって，$p_2 \parallel q_2$.
以下，帰納的にすべての $i \in \{1,2,\ldots,n\}$ で $p_i \parallel q_i$ となる．■

【**例示 6.1** *K*-*L* 変換の例 】2 つの 2 次元ベクトル

$$x_1 = (1,1)^T, \quad x_2 = (-1,-1)^T$$

から *K*-*L* 変換を求めてみる．共分散行列は，$\sum_{i=1}^{2} x_k x_k^T = \begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix}$．したがって，固有値は 4 と 0 である．固有値 4 に関して，

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = 4 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

が成立し，固有ベクトルは，$(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})^T$ となる．これに対して正規直交するもう一つの固有ベクトルは，$(-\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}})^T$ ととれるため，

$$Q = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

となる．実際に，$Qx_1 = (\sqrt{2}, 0)^T, \quad Qx_2 = (-\sqrt{2}, 0)^T$ より，第 1 成分にのみ数値が現れることがわかる．

6.2　主成分分析

n 次元実ベクトル集合 $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^D$ は，n 次元空間上に分布する D 個の点である．これらは，本当に n 次元空間全体に分布しているのだろうか？この集合が何らかの部分空間– 例えば，$k(< n)$ 次元超平面上に分布しているならば，最初の k 成分のみが非零であり，それ以外は零となるような新たな直交座標系へ変換できるはずである．n 次元空間とは，単なる器に過ぎず，器の中身と一致するわけではない．したがって，中身の大きさを計ることは非常に重要な課題となる．このように「ベクトルの集合が存在する部分空間」を張る直交座標系を発見する方法は，統計学において**主成分分析 (principal component analysis)** と呼ばれ，情報処理において広く利用されている．

【**定義 6.3** 】スカラー集合 $\{a_i \in R^1\}_{i=1}^D$ の平均 $\bar{a} = \frac{1}{D}\sum_{i=1}^D a_i$ を中心とする 2 乗誤差の平均値

$$\frac{\sum_{i=1}^D (a_i - \bar{a})^2}{D}$$

をスカラー集合の**分散 (variance)** という．

【**定義 6.4** 】ベクトル集合 $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^D$ の各々の元から平均値 $\bar{x} = \frac{1}{D}\sum_{i=1}^D x_i$ を取り除かれたベクトル集合 $\{y_i = x_i - \bar{x}\}_{i=1}^D$ は，**零平均 (zero mean)** であるという．

【**定義 6.5** 】零平均ベクトル集合 $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^D$ による対称行列

$$\frac{\sum_{i=1}^D x_i x_i^T}{D}$$

の正規直交固有ベクトルを $\{q_i\}_{i=1}^n$ とする．ただし，対応する固有値はその大きさの順に並んでいるとする．これによる直交行列 Q で変換されたベクトル Qx の第 i 成分 $q_i^T x$ を**第 i 主成分 (the i-th principal component)** という．

分散とは，直線上に分布した元がその中心（平均値）からどれだけ散らばって存在するかを示す尺度である．高次元空間において，分散を算定するためには，射影をとるべき方向を定める必要がある．

【補題 6.3 対称行列と分散 **】**零平均化されたベクトル集合 $\{y_i = x_i - \bar{x} \in R^n\}_{i=1}^D$ において，単位ベクトル $u \in R^n$ 方向の（射影の）分散は，

$$\frac{u^T(\sum_{i=1}^D y_i y_i^T)u}{D}$$

に等しい．

【定理 6.2 主成分分析 **】**零平均化されたベクトル集合 $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^D$ において，分散を最大とする軸の方向と分散の値は，対称行列

$$\frac{\sum_{i=1}^D x_i x_i^T}{D}$$

の最大固有値 λ_1 と固有ベクトル q_1 で与えられる．また，分散の最小値とその方向は，最小固有値 λ_n と固有ベクトル q_n で与えられる．

情報圧縮に利用された K-L 変換と主成分分析で得られる直交変換は同じであることに注意する．K-L 変換とは，任意の成分数で 2 乗誤差を最小化する直交変換であったが，これは大きな分散を持つ主成分の順に情報を並べる変換であることを意味している．

6.3 情報処理への展開

6.3.1 汎化問題と画像情報圧縮

汎化問題　6.1 において，画像情報圧縮に最も有利な直交変換は K-L 変換であることをみた．しかし，実際の応用において，これが情報圧縮に用いられることはほとんどない．その理由は，統計数理で主要な研究課題となっている**汎化問題**（**generalization problem**）にある．

"All work and no play makes Jack dull boy"[3] という諺の如く，ある人物を正しく育てるためにはバランスのとれた規則に基づくトレー ニングが不可欠となる．予測系，認識系そして圧縮系において優れた処理系を構成する場合も，本質的に同じ観点が重要となる．一般に，処理系構築において，系の理想的な動作を表した入出力関係が**トレー ニング集合**（**training set**）として用いられる．無論，利用できるトレー ニング集合は，有限であることに注意する．例えば，手書き文字認識系においては，実際の手書き文字デー タを与え，出力の正解率が高くなるように処理系のパラメー タを調整するが，調整の反復に伴って，トレー ニング集合での正解率が高くなる程，トレー ニング集合には属なさい未知デー タの正解率の劣化が生じる．これは，処理系が提示された有限のデー タに過剰に適応したためである．

上記のように処理系の性能は，トレー ニング集合に関する正解率の高さでは計ることはできず，未知デー タに対する能力の高さ，いわゆる**汎化能力** (**generalization capability**) を評価する必要がある．

JPEG と離散コサイン変換　K-L 変換が，画像情報圧縮に利用されない理由は，上述した汎化問題にある．例えば，画像デー タ A に基づいて構成された K-L 変換は，画像デー タ A の圧縮に最適な直交変換となるが，他の画像 B においては，その性能は著しく劣化する．ならば，その直交行列の成分をすべて付加情報として圧縮ファイルに添付できるかといえば，膨大なオー バー ヘッドによって圧縮とはならない．そこで，多種多様な画像デー タによって K-L 変換を構成し，汎化能力を向上させる必要がある．この問題に

[3] 近年の日本においては，"All play and no work makes Taro stupid student" の傾向が強いようである．

関して，画像を自然画像[4] に限定し，K-L 変換を構成した場合，得られる正規直交基底系は，離散コサイン変換に等しくなることが指摘され，以降，離散コサイン変換が最も汎化能力の高い直交変換として広く利用されるようになった．

章末問題

【**問題 6.1** 行列のランク 】実正方行列 A に関して次の設問に答えよ．

(1) $\mathrm{rank}A^2 < \mathrm{rank}A$ を満足する自明な例を答えよ．

(2) $\mathrm{rank}AA^T = \mathrm{rank}A$ を証明せよ．尚，必要であれば $A = [u_1|u_2|\ldots|u_n]$ を用いよ．

【**問題 6.2** *K-L* 変換 】補題 6.1 を証明せよ．

【**問題 6.3** *K-L* 変換 】補題 6.2 を証明せよ．

【**問題 6.4** *K-L* 変換 】3 次元ベクトル

$$x_1 = (0, 1, -1)^T, \quad x_2 = (1, 0, -1)^T, \quad x_3 = (0, 1, -1)^T$$

から *K-L* 変換 Q を求めよ．また，Qx_1, Qx_2, Qx_3 を求めよ．

【**問題 6.5** 主成分分析】3 次元実空間上の 4 つのデータベクトル

$$x_1 = (2, -1, 0)^T,\ x_2 = (0, 1, -2)^T,\ x_3 = (1, 0, -1)^T,\ x_4 = (1, -1, 1)^T$$

に関して次の問に答えよ．

(1) 主成分分析を行い，*3* つの主成分の単位方向ベクトルをそれぞれ求めよ．(ただし，データを零平均化する必要はない)

(2) データの分布について考察せよ．

(3) 次のデータの主成分をそれぞれ求めよ．

$$(a) \quad (5, -2, -1)^T, \qquad (b) \quad (2, -1, 1)^T$$

【**問題 6.6** 対称行列と分散 】補題 6.3 を示せ．

【**問題 6.7** 主成分分析 】定理 6.2 を示せ．

【**問題 6.8** フィルタの構成 】ノイズの印加されていない離散的音響信号 $\{a_i \in R^1\}_{i=1}^D$ を適当な時間幅 n で分割し，n 次元信号ベクトル $\{x_i \in R^n\}_{i=1}^M$ を考えるとき，信号ベクトルを包含する部分空間の次元 m およびこれを記述する正規直交ベクトル $\{e_i\}_{i=1}^m$ をどのように推定すれば良いか述べよ．

[4] いわゆる写真等，実在のものを光学的に撮影した画像を意味する．統計的には，画像平面上の明るさの分布が，正規分布となる画像デ− タとされる．