目次

★ 5　パターン情報の成分分析 (1) — 直交展開

今回からしばらくは，パターン情報の成分を分析する方法を考える．今回と次回は特に，ベクトルで表されるパターンの成分分析を扱う．

★ 5.1　成分を分析したい

「成分を分析する」とはどういうことか，スープの成分を分析するという例（強引な例やけど）で考えてみよう．

スープの味が，塩味や甘味などのいくつかの味の成分の量で決まっており，それらの量は，それぞれの味に対応した調味料の含有量ではかれるものとする．このとき，あるスープに各成分がどれ位ずつ含まれているかがわかれば，右図のようなグラフを描ける．

このような情報が得られることには，次のような利点がある．

- そのスープの特徴（どんな成分を多く含んでいるか）がよくわかる
- ある成分の量を増減させることで味を調節できる
- 成分の量が分かっているので，別のところでそのスープの味を再現できる

音響信号や画像のようなパターン情報でも，これと同じようなことをできると便利そうである (☆ 1)．というわけで，パターンを

$$(\text{あるパターン}) = \alpha_1 \times (\text{成分 } 1) + \alpha_2 \times (\text{成分 } 2) + \alpha_3 \times (\text{成分 } 3) + \cdots \quad (1)$$

のように成分に分解して表す方法を考えてみよう．その際には，次のようなことに気をつけないといけないだろう．

- 何を「成分」とすればよいのか,「成分」はいくつあればよいのか
- $\alpha_1, \alpha_2, \ldots$ はどうやって求めるのか

☆ 1) パターンの特徴をつかめる，特定の成分を増減させてパターンを加工できる，各成分の含有量の情報を伝送するだけでパターンを再構成できる．

★ 5.2　ベクトルで表されるパターンの直交基底による展開

N 次元ベクトル $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_N)$ をいくつかの成分 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots$ を用いて $\boldsymbol{x} = c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \ldots$ のように表すことを考える．ただし，$\boldsymbol{x}$ も $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots$ も N 次元実ベクトルとする (☆ 2)．したがって係数 $c_1, c_2, \ldots$ も実数である．このとき，線形代数で学んだように，次のことが言える．

☆ 2) 実ベクトル: 要素が全て実数のみから成るベクトル．

N 次元ベクトル $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_N$ が**線形独立**であれば，任意の N 次元ベクトル $\boldsymbol{x}$ をこれらの**線形結合**として

$$\boldsymbol{x} = c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_N\boldsymbol{u}_N \quad (2)$$

と一意に表せる．このようなベクトルの集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \ldots, \boldsymbol{u}_N\}$ を**基底**という．

線形独立: linearly independent， 線形結合: linear combination， 基底: basis （複数形は bases），展開: expansion（名）, expand（動）．

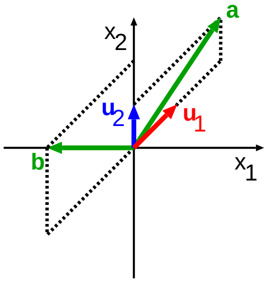
言い換えればこれは，N 個の値から成る任意のパターンを $\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_N$ という成分の和で表せるということである．式 (2) のように表すことを,「ベクトル $\boldsymbol{x}$ を基底 $\{\boldsymbol{u}_k\}$ で**展開する**」という．

下図に，2 次元ベクトルの例を示す．(1),(2) いずれの場合も $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2\}$ は基底であり，$\boldsymbol{a} = (2, 3)$ や $\boldsymbol{b} = (-2, 0)$ のようなベクトルを式 (2) の形に表せていることがわかる．

(1) $\boldsymbol{u}_1 = (1, 1), \boldsymbol{u}_2 = (0, 1)$ の場合:

$$\boldsymbol{a} = 2\boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_2 = 2(1, 1) + (0, 1)$$

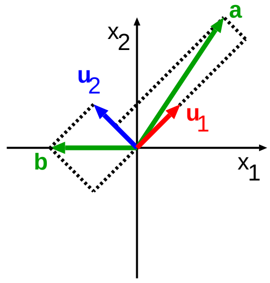
$$\boldsymbol{b} = -2\boldsymbol{u}_1 + 2\boldsymbol{u}_2$$



(2) $\boldsymbol{u}_1 = (1, 1), \boldsymbol{u}_2 = (-1, 1)$ の場合（$\boldsymbol{u}_1$ と $\boldsymbol{u}_2$ は直交してる）：

$$\boldsymbol{a} = \frac{5}{2}\boldsymbol{u}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{u}_2 = \frac{5}{2}(1, 1) + \frac{1}{2}(-1, 1)$$

$$\boldsymbol{b} = -\boldsymbol{u}_1 + \boldsymbol{u}_2$$



Q1. $\boldsymbol{u}_1 = \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, \frac{1}{\sqrt{2}}, 0\right), \boldsymbol{u}_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right), \boldsymbol{u}_3 = \left(\frac{1}{\sqrt{6}}, -\frac{1}{\sqrt{6}}, -\frac{2}{\sqrt{6}}\right)$ とおくと，これらは互いに直交し，ノルム（長さ）が 1 であることを示せ．

Q2. $\boldsymbol{x} = (2, 4, -1)$ に対して，上記の $\{\boldsymbol{u}_k\}$ を用いて 3 つの実数 $c_k (k = 1, 2, 3)$ を

$$c_k = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{u}_k \tag{3}$$

と定義する．このとき c_k の値を求めなさい．さらに，$c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + c_3\boldsymbol{u}_3$ を求めなさい．

基底は，互いに直交するベクトルで作ると都合がよい (☆ 3)．つまり，

$$i \neq j \text{ ならば } \boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j = 0 \text{ であり，} i = j \text{ ならば } \boldsymbol{u}_i \cdot \boldsymbol{u}_j \neq 0$$

となるような $\{\boldsymbol{u}_k\}$ を基底とするということである．なぜなら，この場合

$$\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{u}_k = (c_1\boldsymbol{u}_1 + \cdots + c_N\boldsymbol{u}_N) \cdot \boldsymbol{u}_k \tag{4}$$

$$= c_1\boldsymbol{u}_1 \cdot \boldsymbol{u}_k + \cdots + c_k\boldsymbol{u}_k \cdot \boldsymbol{u}_k + \cdots + c_N\boldsymbol{u}_N \cdot \boldsymbol{u}_k \tag{5}$$

$$= c_k\boldsymbol{u}_k \cdot \boldsymbol{u}_k = c_k||\boldsymbol{u}_k||^2 \tag{6}$$

となるので，係数を求める計算が

$$c_k = \frac{\boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{u}_k}{||\boldsymbol{u}_k||^2} \tag{7}$$

と簡単になるからである．さらに，基底を構成するベクトルのノルム（長さ）を全て 1 に，すなわち $||\boldsymbol{u}_k|| = 1$ としておけば，係数の計算はもっと簡単に，

$$c_k = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{u}_k \tag{8}$$

とするだけになる．

☆ 3) 成分分析という観点からは，直感的にも成分同士が直交している方がよいことがわかる．例えば,「塩」と「こしょう」を成分とする方が,「塩」と「塩こしょう（塩とこしょうの混ざった調味料）」を成分とするよりよさそうだろう．

互いに直交するベクトルから成る基底を**直交基底**といい，ノルムが 1 で互いに直交するベクトルから成る基底を**正規直交基底**という．$\{\boldsymbol{u}_1, \ldots, \boldsymbol{u}_N\}$ が正規直交基底だった場合，上述のように展開係数 c_k は次式で求められる．

直交する: orthogonal（形）．
直交基底: orthogonal basis.
正規直交基底: orthonormal basis.

$$c_k = \boldsymbol{x} \cdot \boldsymbol{u}_k \qquad (k = 1, 2, \ldots, N) \tag{9}$$

★ 5.3　直交展開とデータ圧縮

直交展開は，パターンの成分分析だけでなく，データ圧縮にも利用することができる．

N 個の値から成るパターン $\boldsymbol{x}$ が，基底 $\{\boldsymbol{u}_k\}$ を用いて次のように展開できるとする．

$$\boldsymbol{x} = c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_N\boldsymbol{u}_N \tag{10}$$

ここで，各基底ベクトルに重要なものから順に番号がついている（k が小さいものほど重要な成分である）としよう (☆ 4)．すると，番号の大きな基底を無視して

$$\widetilde{\boldsymbol{x}} = c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_H\boldsymbol{u}_H \qquad (H < N) \tag{11}$$

というベクトルを考えると，$\widetilde{\boldsymbol{x}}$ は $\boldsymbol{x}$ の近似になる（両者の差は小さい）と期待できる．このことを利用してデータ圧縮を実現できる (☆ 5)．

具体的に，$N = 1000$ としてみよう．この場合，$\boldsymbol{x}$ をそのまま扱うならその要素である 1000 個の値を記憶する必要がある．しかし，$H = 10$ 個の基底で近似できるなら，c_1 から c_{10} までの 10 個の値を記憶しておくだけで済む．必要なときに式 (11) の計算を行なって近似値 $\widetilde{\boldsymbol{x}}$ を得られるからである．

次回の講義では，実際のデータ圧縮に用いられる直交基底の例を紹介する．

☆ 4) 厳密には「重要な」成分とはどういうものか定義しなければならないが，ここでは直感的な説明にとどめておく．

☆ 5) 近似であることからわかるように，一般に不可逆圧縮である．

★ 5.4　画像の直交展開の例

直交展開に用いる基底は直交基底（もしくは正規直交基底）であれば何でもよいので，用途に応じて様々なものが用いられる．ここで紹介するのは，データの統計的な性質を分析する手法である**主成分分析**を画像データに適用して作った正規直交基底の例である．この方法ではデータに応じて基底を計算するので，図からわかるように,「猫の顔」や「人の顔」といった特定のデータをうまく表現できるような基底を得ることができる．このような手法は，画像中の顔を検出したりその顔から個人を識別したりするパターン認識の分野で広く用いられている．詳しくは説明しないが，この方法では，データからある行列を計算し，その固有ベクトルを基底とする．そのため，顔画像データから得られる基底のことを固有顔と呼ぶ (☆ 6)．

☆ 6) 高橋の数理情報セミナーあるいは大学院科目「視覚認知計算特論」で登場するかも．

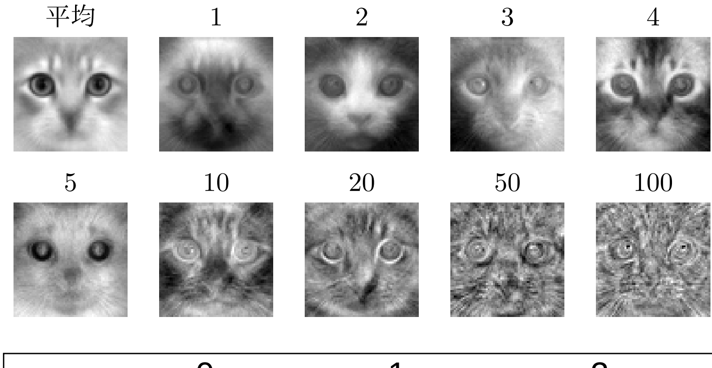


図 1: 猫の固有顔の例．左上の画像は多数の猫の顔画像の平均であり，$1, 2, \ldots$ と記された画像は固有顔を可視化したもの（番号の小さいものほど対応する固有値が大きく,「重要」な基底）．これらの固有顔は正規直交基底を成している．

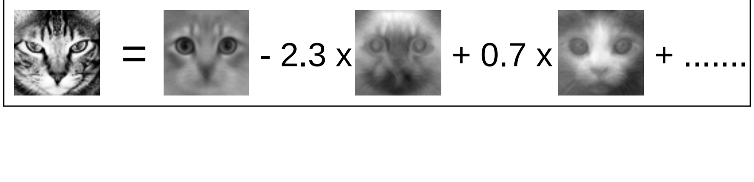


図 2: 固有顔を用いた猫の顔の展開の概念図．画像の上の番号は，固有顔の番号に対応している（0 と記された画像は平均）．

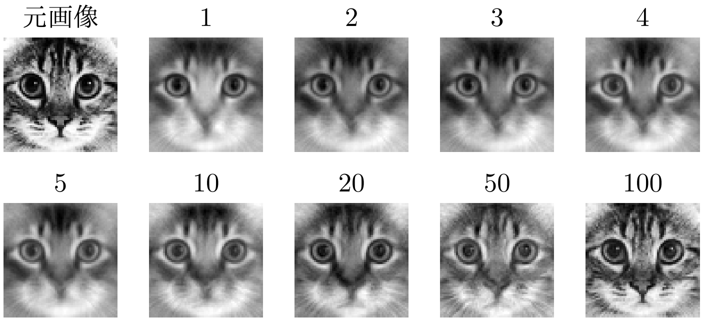


図 3: 固有顔を用いた近似．左上は 4096 個の画素値から成る元画像．それ以外は，画像の上に記された数の基底のみを用いて元画像を近似したもの．例えば，5 と記された画像は，前頁の 1 番から 5 番までの基底のみを用いて元画像を近似しており，5 つの基底に対応する 5 つの展開係数の値のみでこの画像の情報を表現していることになる．

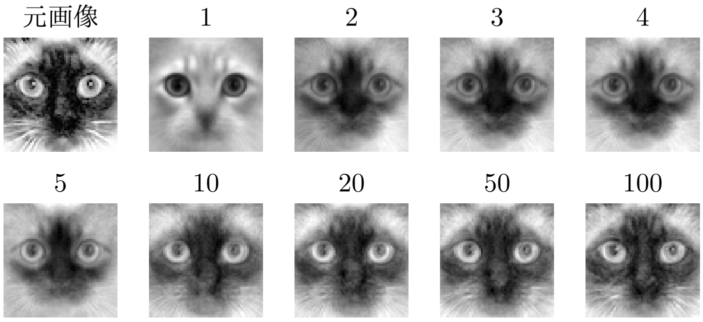


図 4: もうひとつの例．

宿題

Q3.

3 つの 4 次元ベクトル $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ が以下のように与えられているとき，次の問に答えなさい．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{u}_1 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \\
\boldsymbol{u}_2 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \\
\boldsymbol{u}_3 &= \left(\frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0, 0\right)
\end{aligned}
$$

(1) $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3$ が互いに直交し，ノルムが 1 であることを示しなさい．

(2) $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \boldsymbol{u}_4\}$ が正規直交基底を成すようなベクトル $\boldsymbol{u}_4$ を求めなさい．

(3) (2) で求めた正規直交基底を用いて，$\boldsymbol{x} = (4, 0, -4, -4)$ を $\boldsymbol{x} = C_1\boldsymbol{u}_1 + C_2\boldsymbol{u}_2 + C_3\boldsymbol{u}_3 + C_4\boldsymbol{u}_4$ と展開できるとき，展開係数 C_1, C_2, C_3, C_4 の値を求めなさい．ただし，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_3, \boldsymbol{u}_4\}$ が正規直交基底であることをうまく利用すること．