Vol.2011-MPS-82 No.19
2011/3/8

カーネル行列の厳密な対角化と近似，およびガウス過程への適用

綴　木　　　馴[†]

近年，カーネル法を用いた確率モデルの研究が盛んになり，統計力学的な解析の簡便性から周期境界条件を課し，フーリエ空間で議論する研究がなされる様になった．しかしながら，周期境界条件下でのカーネル行列の厳密な対角化行列の導出はまだ行われていない．本論文では，周期境界条件下でのカーネル行列の厳密な対角化と近似を行い，それらによって対角化されたカーネル行列をガウス過程に用いる．そして導出した対角化行列を，ガウス過程に用いることにより，より良い解析結果を示す．

An accurate diagonalization and an approximation of the matrix, and an application for the Gaussian process.

In recent years, many studies on Kernel methods and the statistical mechanics under a periodic boundary condition have been actively pursuit. However, a strict derivation of diagonalization for Kernel matrix under the periodic boundary condition has remained to be open. In this paper, we diagonalize the Kernel matrix strictly under the periodic boundary condition. We also use the diagonalized Kernel for Gaussian process. Additionally, in the study of the Gaussian process, we show the qualitative analytical results with the diagonalized Kernel. The findings of the analysis reveal the rapport of the analytical results and numerical results.

1. はじめに

近年，確率モデルを用いた関数近似問題の研究が盛んになり，画像修復[2] やガウス過程[1] への応用がなされている．その一方でそれらの研究における，統計力学を用いた数理解析も行われている[1]．数理解析を行う際には，フーリエ空間上での議論を行うために周期境界条件を課し，カーネル行列の対角化がなされている．しかしながら，本論文で取り扱う様な周期境界条件を満たすカーネル行列の厳密な対角化は未だになされていない．

繰り返しになるが，図 1 に示す様に本論文では周期境界条件を採用している．このため，入力の素子数を N としたとき，図 1(B) の様に 2 点間の距離が $\frac{N}{2}$ 超える場合は，図 1(C) の様に原点 0 を跨ぐ様に取り直さなければならない．よって，2 点間の距離に対して場合分けが必要である．これまでの論文[1] では，この場合分けを行っていなかったため，数値解析の結果が発散するなどしていた．

図 1(A) の様に，2 点間の距離 $|a-b|$ が $\frac{N}{2}$ 超えない場合は，距離をそのままにして良い．一方で図 1(B) の様に，2 点間の距離 $|c-d|$ が $\frac{N}{2}$ 超える場合は，図 1(C) の様に $N-|c-d|$ を 2 点間の距離とする．

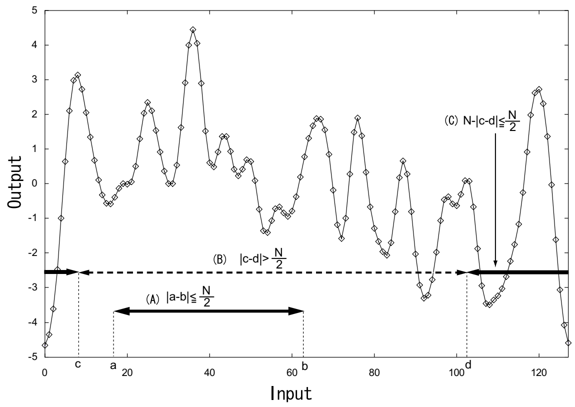

図 1　$N = 128$ 個の等間隔離散数値の入力に対して，周期境界条件が課されている様子．出力はガウス分布に従う．(A)2 点間の距離 $|a-b|$ が，$\frac{N}{2}$ 超えない場合．(B)2 点間の距離 $|c-d|$ が，$\frac{N}{2}$ 超える場合は，(C) の様に $N-|c-d|$ を 2 点間の距離とする．このとき (C) は原点 0 を跨ぐ．

周期境界条件を用いることに対しては，是非が問われるかも知れない．しかしながら，文献[2] において自然画像処理を行う場合にも周期境界条件を用いたが，出力された自然画像に違和感は無かった．一方で，これまでの周期境界条件を課した著者らの画像処理の文献[2] では上記の様な場合分けをしていなかったため，

† 岡山理科大学工学部
Okayama University of Science Faculty of Engineering

ノイズの相関長の長さに制限があった．具体的には上記文献で相関長として用いた κ が $\kappa > 7$ でオーバーフローを起こしていた．

本論文では，図 1 の様な場合分けを用いることにより，これまでの解析を再計算することでカーネル行列の厳密な対角化を行う．そして，これまでの近似的な対角化の妥当性を考察する．最後に，それらのカーネル行列をガウス過程に適用し，ガウス過程の定性的な解析を行う．その結果，これまでの文献では見られなかった，より良い結果が得られた．

2. ガウス過程の解説

まずは本論文で用いるガウス過程への適用を行うため，ガウス過程について簡単な解説を行う．一般に，入力の個数を N とするとき，ガウス過程の入力値 $\boldsymbol{x}_j (1 \le j \le N)$ は D 次元で与えられる．一方で，出力値 $t_j, (1 \le j \le N)$ は 1 次元になる．このとき，学習用データセットを以下のように定義する．

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_j & (1 \le j \le N) \\ t_j & (1 \le j \le N) \end{cases} \tag{1}$$

また，D 次元の未知入力データを $\boldsymbol{x}_{N+1}$ としたとき，その一次元の出力値は t_{N+1} となる．このとき出力データセットを以下のように定義する．

$$\begin{cases} \boldsymbol{x}_{N+1} \\ t_{N+1} \end{cases} \tag{2}$$

ガウス過程では，出力値 t_j には平均 0，分散 b^2 のガウス分布に従うノイズがすでに重畳されていると仮定される．

本論文では解析を簡単化するために，ガウス過程の入力，式 (1) を等間隔の離散値 $\boldsymbol{j} = \{j\}$ とし，出力に周期境界条件を仮定する．よって，入力ベクトル $\boldsymbol{j}$ の要素のとりうる値は 1 次元で以下のようにする．

$$1, 2, \cdots, N \tag{3}$$

ただし，N は偶数とする．

ガウス過程ではノイズの入っていない真値の出力データも，ノイズもガウス分布で与えられる．ノイズの混ざっていない真値の出力データ $\boldsymbol{S} = \{S_j\}$ の確率分布は以下で与えられる．

$$P(\boldsymbol{S}) = \frac{1}{Z_{\boldsymbol{S}}} \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{S}^T A^{-1} \boldsymbol{S}\right) \tag{4}$$

$$Z_{\boldsymbol{S}} = (2\pi)^{\frac{N^D}{2}} |A|^{\frac{1}{2}} \tag{5}$$

ここで，A は相関行列であり，周期境界条件を満たすために，その要素 A_{fj} は下記の，式 (6) と式 (8) によって与えられる．

$$A_{fj} = a^2 \exp[-v^2 |f-j|^2] \tag{6}$$

$$(|f-j| \le \frac{N}{2}) \tag{7}$$

$$A_{fj} = a^2 \exp[-v^2 (N - |f-j|)^2] \tag{8}$$

$$(|f-j| > \frac{N}{2}) \tag{9}$$

ここで，a, v は実数である．また，式 (8) は，$|f-j| > \frac{N}{2}$ であるので，$f = j$ には，ならないことに注意すること．A_{fj} の添え字に f を用いて i を用いなかったのは，後述するフーリエ変換で虚数単位 i を用いることによる混乱を防ぐためである．

ノイズの混ざった学習用データ $\boldsymbol{t} = \{t_j\}$ の確率分布は

$$P(\boldsymbol{t}|C) = \frac{1}{Z_C} \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{t}^T C^{-1} \boldsymbol{t}\right) \tag{10}$$

$$Z_{\boldsymbol{C}} = (2\pi)^{\frac{N^D}{2}} |C|^{\frac{1}{2}} \tag{11}$$

で与えられる．C は共分散行列であり，その成分 C_{fj} は以下の式で与えられる．

$$C_{fj} = A_{fj} + B_{fj} \tag{12}$$

ここで，B はノイズの確率分布の共分散行列であり，その成分 B_{fj} は

$$B_{fj} = b^2 \delta_{f,j} \tag{13}$$

である．ここで，b は実数，また $\delta_{f,j}$ はクロネッカーデルタであり次の式で与えられる．

$$\delta_{f,j} = \begin{cases} 1, & f = j \\ 0, & f \ne j \end{cases} \tag{14}$$

このとき，ノイズの確率分布は以下のように与えられる．

$$P_{out}(\boldsymbol{t}|S) = \frac{1}{Z_{\mathbf{noise}}} \exp\left(-\frac{1}{2}(\boldsymbol{t} - \boldsymbol{S})^T B^{-1} (\boldsymbol{t} - \boldsymbol{S})\right) \tag{15}$$

$$Z_{\mathbf{noise}} = (2\pi)^{\frac{N^D}{2}} |B|^{\frac{1}{2}} \tag{16}$$

ここで，未知データの出力を u とすれば，学習用出力データが与えられた場合の未知データ u の事後確率関数が計算できる．

$$P(u|\boldsymbol{t}, a^2, v^2, b^2) = \frac{P(u, \boldsymbol{t}|a^2, v^2, b^2)}{P(\boldsymbol{t}|a^2, v^2, b^2)} \tag{17}$$

未知入力 f_{N+1} と学習用入力 f の相関は以下のようになる．

$$k(f, f_{N+1}) = a^2 \exp\left[-v^2 (f - f_{N+1})^2\right] \tag{18}$$

$$k_{N+1}(f_{N+1}, f_{N+1}) = a^2 \exp\left[-v^2(f_{N+1} - f_{N+1})^2\right] + b^2\delta_{N+1,N+1} \quad (19)$$

$$= a^2 + b^2 \quad (20)$$

ここで，要素 $k(f, f_{N+1})$ を持つベクトル $\boldsymbol{k}$ を次の様に定義する．

$$\boldsymbol{k}^T = \{k(1, f_{N+1}), \cdots, k(f, f_{N+1}), \cdots, k(N, f_{N+1})\} \quad (21)$$

未知出力データの平均は以下の式で与えられる．

$$u = \boldsymbol{k}^T C^{-1}\boldsymbol{t} \quad (22)$$

$$= \sum_f \sum_j k_f C_{fj}^{-1} t_j \quad (23)$$

3. カーネル行列の厳密な対角化

対象とする確率モデルに離散化および周期境界条件を課すことにより，ここではカーネル行列が，特に対称な巡回行列，すなわち並進対称行列となる場合について考える．上記の条件により，t_j のフーリエ変換

$$\tilde{t}_p = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j t_j e^{-ip\cdot j} \quad (24)$$

が可能になる．ここで，i は虚数単位である．逆フーリエ変換は以下で与えられる．

$$t_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_p \tilde{t}_p e^{ip\cdot j} \quad (25)$$

ここで，ベクトル $\boldsymbol{p}$ の要素のとりうる値は以下のようになる．

$$0, \frac{2}{N}\pi, \frac{4}{N}\pi, \cdots, \frac{2(N-1)}{N}\pi \quad (26)$$

一般に任意の巡回行列 R_{fj} のフーリエ変換 $\tilde{R}_{hk}$ は,

$$\tilde{R}_{hk} = \sum_f \sum_j e^{i(h\cdot j - k\cdot f)} R_{fj} \quad (27)$$

で与えられる．

ここで，カーネル行列としてよく用いられる行列要素，式 (6)，式 (8) のフーリエ変換を考える．周期境界条件が課せられているので場合分けを行っている．これまでの研究[1] では，この場合分けが行われていなかった．そのため，特定の状態になると解析値が発散していた[1]．a および v は実数で，N は素子の数である．また f，j は素子の位置である．本来のガウス過程では，A_{fj} を

$$A_{fj} = a^2 \exp[-\sum_{d=1}^{D} v_d^2 |f^d - j^d|^2] \quad (28)$$

と置いている．ここで，d はべき乗ではなく，入力次元の添え字である．本論文では簡単化のために入力次元を 1 次元で考えるので $D = 1$ とした式を用いる．

$|f - j| \leq \frac{N}{2}$ のとき，式 (6) は次の様に展開できる．

$$A_{fj} = \frac{a^2}{2} \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}} \exp[-v^2 l^2](\delta_{f,j+l} + \delta_{f,j-l}) \quad (29)$$

ここで，l の範囲が $0 \leq l \leq \frac{N}{2}$ になっていることに留意して欲しい．式 (27) を用いると,

$$\tilde{A}_{hk} = \sum_f \sum_j e^{i(h\cdot j - k\cdot f)} \times \left[\frac{a^2}{2} \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}} e^{-v^2 l^2}(\delta_{f,j+l} + \delta_{f,j-l})\right] \quad (30)$$

したがって,

$$\tilde{A}_k \equiv \tilde{A}_{kk} = a^2 \sum_{l=0}^{\frac{N}{2}} e^{-v^2 l^2} \cos(lk) \quad (31)$$

$$(l \leq \frac{N}{2}) \quad (32)$$

$|f - j| > \frac{N}{2}$ のとき，式 (8) も次の様に計算できる．

$$A_{fj} = \frac{a^2}{2} \sum_{l=\frac{N}{2}+1}^{N-1} \exp[-v^2(N-l)^2](\delta_{f,j+l} + \delta_{f,j-l}) \quad (33)$$

ここでは，l の範囲が $\frac{N}{2} + 1 \leq l \leq N - 1$ になっていることに留意して欲しい．ここで，式 (27) を用いると,

$$\tilde{A}_k \equiv \tilde{A}_{kk} = a^2 \sum_{l=\frac{N}{2}+1}^{N-1} e^{-v^2(N-l)^2} \cos(lk) \quad (34)$$

$$(l > \frac{N}{2}) \quad (35)$$

同様の計算により，式 (13) をフーリエ変換により対角化すると,

$$\tilde{B}_p = b^2 \quad (36)$$

となる．

ここで，式 (23) にフーリエ表記を用いると以下の式で与えられる．

$$u = \sum_q \tilde{k}_{-q} \tilde{C}_q^{-1} \tilde{t}_q \quad (37)$$

本論文では未知出力データの平均 u を修復データとして用いる．u は実数なので，式 (37) の虚部は考えなくても良い．ここで $\tilde{k}_{-q}$ は $\tilde{k}_q$ の複素共役である．

4. カーネル行列の近似による対角化

本論文では，A_{fj} を式 (6) や式 (8) の様に場合分けを行ったうえで対角化を行ったが，これまでの研究では場合分けを行わなわず，単に l の範囲を $-(N-1) \leq l \leq N-1$ とした．この正当性について少し議論してみよう． 図 2 は式 (6) と式 (8) にしたがって生成さ

$$\begin{pmatrix}
1.00 & 0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 \\
0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 \\
0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 \\
0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & 0.00 \\
0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 \\
0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 \\
0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00
\end{pmatrix}$$

図 2 式 (6) と式 (8) にしたがって生成された行列 A_{fj}． $v = 1.0$, $N = 8$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした．

れた行列 A_{fj} で $v = 1.0$, $N = 8$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ としたときのものである．図 2 から行列 A_{fj} が周期境界条件を満たした並進対称行列であることが確認できる． 次に，式 (31) と式 (34) により生成された S_f と

$$\begin{pmatrix}
1.00 & 0.37 & 0.01 & -0.00 & -0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 \\
0.37 & 0.99 & 0.37 & 0.02 & -0.00 & -0.00 & -0.00 & 0.01 \\
0.01 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & -0.00 & -0.00 & -0.00 \\
-0.00 & 0.02 & 0.37 & 0.99 & 0.37 & 0.02 & -0.00 & 0.00 \\
-0.00 & -0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.01 & 0.37 & 0.02 & 0.00 \\
0.00 & -0.00 & -0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.01 & 0.38 & 0.02 \\
0.02 & -0.00 & -0.00 & -0.00 & 0.02 & 0.38 & 1.00 & 0.37 \\
0.37 & 0.01 & -0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00
\end{pmatrix}$$

図 3 式 (31) と式 (34) にしたがって生成された行列 A_{ij}． $v = 1.0$, $N = 8$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とし，S_f と S_j をそれぞれ $100,000$ 個生成し，その相関をとった．

S_j を元に相関をとり，$100,000$ 回の平均をとったものを図 3 に示す．図 3 より，オリジナルの A_{fj} である図 2 とほぼ一致していることが分かる．

図 4 は式 (6) と式 (8) の様に場合分けせずに式 (6) のみで S_f と S_j を生成し，相関をとったものである．ただし，l の範囲を $0 \leq l \leq N-1$ とはせずに $-(N-1) \leq l \leq N-1$ とした．条件は図 2 と同じく，$v = 1.0$, $N = 8$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした．図 2 と比較すると，こちらも図 3 と同じレベルで図 2 と一致していることが分かる．しかしながら，v が 0 に近い値をとると，固有値が負の値をとってしまい，S_f を正しく生成できなくなる．

$$\begin{pmatrix}
0.99 & 0.36 & 0.02 & 0.00 & -0.00 & -0.00 & 0.02 & 0.37 \\
0.36 & 0.99 & 0.36 & 0.01 & 0.00 & -0.00 & -0.00 & 0.02 \\
0.02 & 0.36 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 \\
0.00 & 0.01 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 & -0.00 & 0.00 \\
-0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 0.99 & 0.37 & 0.02 & 0.00 \\
-0.00 & -0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 & 0.02 \\
0.02 & -0.00 & 0.00 & -0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00 & 0.37 \\
0.37 & 0.02 & 0.00 & 0.00 & 0.00 & 0.02 & 0.37 & 1.00
\end{pmatrix}$$

図 4 式 (6) と式 (8) の様に場合分けせずに式 (6) のみで S_f と S_j を生成し，相関をとったもの．ただし，l の範囲を $-(N-1) \leq l \leq N-1$ とした．条件は図 2 と同じく，$v = 1.0$, $N = 8$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした．図 2 と比較して見ると，ほぼうまくいっていることが分かる．

5. 理論の解説

ここからは，前節で求めた修復データ u_j とノイズの混ざっていない真値のデータ S_j との平均二乗誤差 E_1 を求める方法を簡単に解説する．詳細は文献[1] を参考にして欲しい．本論文では ^ が付いた変数を未知のハイパーパラメータと定義する．E_1 を以下のようにおく．E_1 はオリジナルデータ S_j と修復データ u_j の平均二乗誤差なので，小さければ小さいほどモデルが良い結果を出力していることになる．式 (37) は任意の入力からなる出力なので，通常連続値をとるが，実際に式 (38) で計算するときは離散値で計算するので u に添え字の j を付ける．

$$E_1 = \left\| \frac{1}{N} \sum_j (S_j - u_j)^2 \right\| \tag{38}$$

ここで，$||\cdot||$ は同時確率分布 $P(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{S}) = P_{out}(\boldsymbol{t}|\boldsymbol{S}) P(\boldsymbol{S})$ に関する平均である．

式 (38) をフーリエ表記すると以下のようになる．

$$E_1 = \frac{1}{N} \sum_{\boldsymbol{k}} \left\| \left(\tilde{S}_{\boldsymbol{k}} - \tilde{u}_{\boldsymbol{k}} \right) \left(\tilde{S}_{-\boldsymbol{k}} - \tilde{u}_{-\boldsymbol{k}} \right) \right\| \tag{39}$$

$P(\boldsymbol{t}, \boldsymbol{S})$ はフーリエ表記では対角化されているので，各 $\boldsymbol{k}$ については文献[1] の式 (41) を参考にすれば容易に計算することができる．

ここで，

$$\tilde{A}_{\boldsymbol{k}}^{-1} + \tilde{B}_{\boldsymbol{k}}^{-1} = \tilde{C}'_{\boldsymbol{k}} \tag{40}$$

とおくと

$$\left\| \left(\tilde{S}_{\boldsymbol{k}} - \tilde{u}_{\boldsymbol{k}}\right)\left(\tilde{S}_{-\boldsymbol{k}} - \tilde{u}_{-\boldsymbol{k}}\right) \right\| = \frac{1}{\tilde{C}'_{\boldsymbol{k}}} + \left(\frac{\tilde{B}_{\boldsymbol{k}}^{-1}}{\tilde{C}'_{\boldsymbol{k}}} - \hat{\tilde{A}}_{-\boldsymbol{k}} \hat{\tilde{C}}_{\boldsymbol{k}}^{-1} \right)^2 \frac{1}{\tilde{B}_{\boldsymbol{k}}^{-1} - \frac{\left(\tilde{B}_{\boldsymbol{k}}^{-1}\right)^2}{\tilde{C}'_{\boldsymbol{k}}}} \tag{41}$$

文献[1]によると，

$$\hat{a} = a, \quad \hat{b} = b, \quad \hat{v} = v \tag{42}$$

のとき，平均最小二乗誤差 E_1 は以下の最小値となる．ここでも場合分けが必要となる．

$$E_{1_{min}} = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{\tilde{C}'_k} \tag{43}$$

ここで $l \leq \frac{N}{2}$ のとき

$$= \sum_k \frac{1}{N\left(\frac{1}{a^2 \sum_l e^{-v^2 l^2} e^{i(k \cdot l)}} + \frac{1}{b^2}\right)} \tag{44}$$

さらに $l > \frac{N}{2}$ のとき

$$= \sum_k \frac{1}{N\left(\frac{1}{a^2 \sum_l e^{-v^2 (N-l)^2} e^{i(k \cdot l)}} + \frac{1}{b^2}\right)} \tag{45}$$

同様にして，ノイズ無しの真の出力データと修復前のノイズ入りの出力データとの平均二乗誤差を求めると以下の様に求まる．

$$E_2 = \left\| \frac{1}{N} \sum_j (S_j - t_j)^2 \right\| = \frac{1}{N} \sum_k b^2 = b^2 \tag{46}$$

6. 結　　果

6.1 厳密なカーネルを使った場合

図 5 に式 (45) と式 (46) の解析結果を示す．横軸に v，縦軸に平均二乗誤差の図を示す．パラメータは $N = 128, a = 1.0, b = 1.0$ とした．(A) の破線は理論値，すなわち式 (45) による修復後の平均二乗誤差を示す．これは，式 (38) を最小化した式 (45) に代入して，理論上の最低平均二乗誤差 E_{1min} を求めたものである．(A) の実線は，式 (37) により修復した数値解析による修復後の平均二乗誤差を示す．数値解を得るために 1000 回のシミュレーションを行い，平均をとった．(B) の破線は理論値，すなわち式 (46) による修復前の平均二乗誤差を示し，(B) の実線は数値解析による修復前の平均二乗誤差を示す．曲線 (A) も (B) も解析解と数値解がよく一致していることが分かる．

図 5 では，0 付近で数値解析解が理論値からずれて

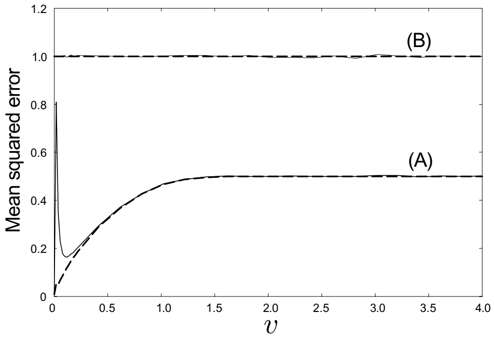

図 5　横軸に v，縦軸に平均二乗誤差とした場合の図．$N = 128$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした場合．(A) の破線は理論値，式 (45) による修復後の平均二乗誤差．(A) の実線は数値解析による修復後の平均二乗誤差．(B) の破線は理論値，式 (46) による修復前の平均二乗誤差．(B) の実線は数値解析による修復前の平均二乗誤差．

$v = 0.12$ で極小値をとった．そこで，$v = 0.12$ においてのガウス過程の挙動が，どうなっているかを図 6 に示す．ここでは，図 5 と同じ条件 $N = 128$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とし，$v = 0.12$ とした場合の，ガウス過程の挙動を示す．横軸に入力，縦軸に出力とした．実線がオリジナルのデータ，菱形の印がノイズ入りのデータ，破線が修復データである．実線のオリジナルデータと破線の修復データがよく一致していることが分かる．

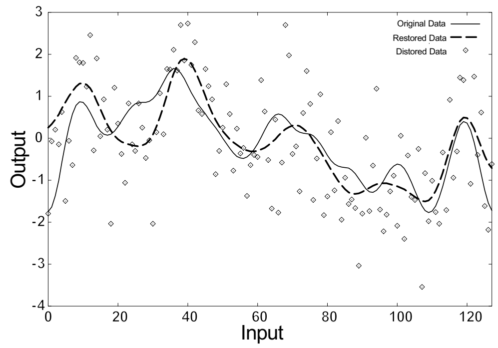

図 6　横軸に入力，縦軸に出力とした場合の図．$v = 0.12$, $N = 128$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした場合．実線がオリジナルデータ．破線が修復データ．菱形印が劣化データである．

ここで，図 6 の修復過程では，オリジナルデータ S_j は与えられておらず，推定で u を出力しているに過ぎない．したがって，オリジナルデータ S_j と修復データ u に誤差があるのは必然のことである．

6.2 近似カーネルを使った場合

ここで，場合分けをせずに l の範囲を $-(N-1) \leq l \leq N-1$ とした従来の方法を使用した場合について

述べる．図 7 に $N = 128$ の場合の平均二乗誤差の図を示す．横軸に v，縦軸に平均二乗誤差とした．またパラメータは $a = 1.0, b = 1.0$ とした．(A) の破線は理論値，すなわち式 (45) による場合分けした場合の修復後の平均二乗誤差であり，参考のために掲載した．実線は場合分けせずに，l の範囲を $-(N-1) \leq l \leq N-1$ として数値解析した場合の修復後の平均二乗誤差である．(B) の実線は数値解析による修復前の平均二乗誤差である．

場合分けしなかった場合は $v = 0$ 付近で修復誤差が 1 を超えてしまい，ガウス過程として使い物にならなくなっている．それ以外では場合分けした場合の理論値とほぼ完全に一致していることが分かる．このことから，これまでの研究で場合分けをせずに，l の範囲を $-(N-1) \leq l \leq N-1$ としたことの正当性を訴えることができる．

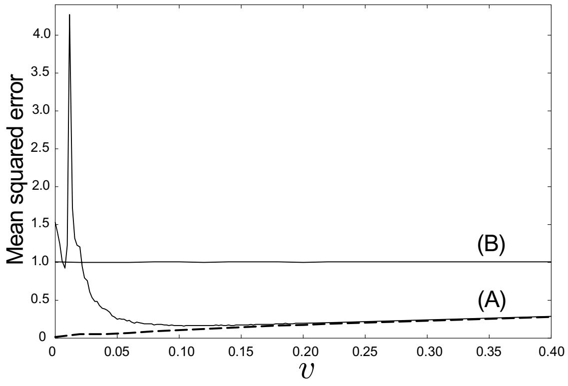

図 7 横軸に v，縦軸に平均二乗誤差とした場合の図．$N = 128$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした場合．太い破線は式 (6) と式 (8) の様に場合けをした理論値．細い実線は場合分けをせずに l の範囲を $-(N-1) \leq l \leq N-1$ とした場合の数値解．

それでは，図 7 において，最も平均二乗誤差が低くなっている点 $v = 0.1040$ でのガウス過程の挙動を図 8 に示す．$v = 0.1040$, $N = 128$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とし，横軸に入力，縦軸に出力とした．実線がオリジナルデータ．破線が修復データ．菱形印が劣化データである．図 8 から修復がうまく行っていることが確認できる．

7. むすび

本論文では，並進対称行列（並進対称なカーネル）を場合分けすることによって厳密な対角化を行った．そして，厳密に対角化されたカーネルをガウス過程に適用した．ガウス過程に適用した結果，従来の場合分けを行わなかった場合は v が 0 に近づくにつれ平均

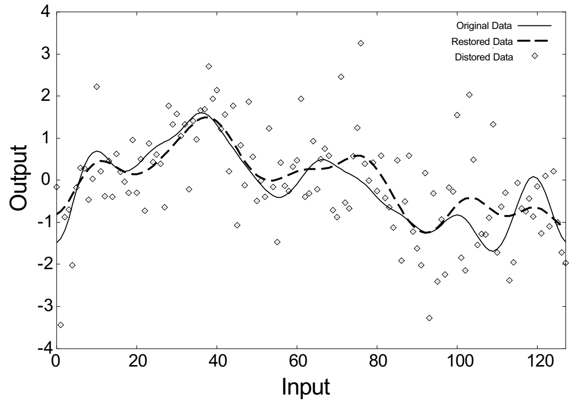

図 8 横軸に入力，縦軸に出力とした場合の図．$v = 0.1040$, $N = 128$, $a = 1.0$, $b = 1.0$ とした場合実線がオリジナルデータ．破線が修復データ．菱形印が劣化データである．

二乗誤差が発散すると言う現象が現れていたが，厳密な対角化を行った場合は，平均二乗誤差が発散せずに $v = 0$ において収束した．一部 $v = 0$ 付近で平均二乗誤差の値が 1 以下の範囲で急激に上がる点があるが，その点においてもガウス過程はうまく修復を行っていることが確認できた．

また，本論文では，従来の場合分けしない方法についても議論を行った．場合分けしない代わりに，l の範囲を $-(L-1) \leq l \leq L-1$ とした．場合分けしない従来の方法では，v が 0 に近づくにつれ平均二乗誤差が大きくなりガウス過程として使い物にならなくなるが，v が 0 から幾分離れていれば，厳密な対角化を行った解析解とほぼ完全に一致することが確認でき，ガウス過程も十分に機能することが分かった．v が 0 付近において平均二乗誤差が大きくなりすぎる原因についてはある程度分かっている．v が 0 付近では対角化された値，すなわち並進対称行列の固有値がマイナスになってしまうためガウス過程がうまく機能しなくなる．上記の場合分けを使った場合でも v が 0 付近において平均二乗誤差が幾分大きくなることについては今後の課題を残す結果となった．

参考文献

1) 綴木 馴, 酒井英昭, “ガウス過程の統計力学的解析,” 電子情報通信学会論文誌, Vol. J90-A No.9 pp685-695, Sep, 2007.
2) Tsuzurugi J, Eiho S, “Image restoration of natural image under spatially correlated noise,” IEICE Transactions. Fundamentals, Volume and Number: Vol.E92-A,No.3,pp.-,Mar. (2009).