

入力空間での計量に基づいた核主成分分析

藤木 淳[†] 赤穂 昭太郎[†]

元来の核主成分分析では特徴空間におけるユークリッド計量に基づいた最小二乗推定によって主たる部分空間を求めるが、本稿では入力空間における計量に基づいて主たる部分空間を求める枠組みについて説明する。この枠組みは特に事前知識が入力空間の計量として埋め込まれているような場合に有効であると考えられる。

Kernel PCA based on the metric of the input space

JUN FUJIKI[†] and SHOTARO AKAHO[†]

Original kernel principle component analysis is finding the principle subspace of the data from least squares estimation based on the metric of feature space. However, the paper proposes the method to find the principle subspace of the data from least squares estimation based on the metric of input space. The proposed method is efficient when the metric of input space is known.

1. はじめに

主成分分析 (principal component analysis ; PCA) は空間のデータ解析において非常に良く用いられている手法であり、その目的は与えられたデータの構造を把握するため、データからの誤差の分離や、データの主構造の決定に用いられる。PCA は、データをユークリッド (欧幾里得 ; 欧氏) 空間の点とみなし、データの真値は欧氏空間内のアフィン空間上に分布するという仮定において有効な手法である。また PCA は誤差を欧氏距離で測定し、誤差の二乗和を最小とする **最小二乗 (least squares ; LS)** 基準において最尤推定を与えることが知られている。しかしデータの真値や主構造がアフィン空間上に分布するという仮定が弱いデータには PCA は不向きであるため PCA の非線型化が行なわれた。 **非線型主成分分析 (nonlinear PCA ; NLPCA)** の考え方は、非線型構造をもつデータをアフィン空間上に分布させるために高次元空間に写像し、その後通常 PCA を行なう所にある。そのため、データの構造を知ること、そのデータをアフィン空間上に分布させる写像を求めることは同じである。その写像が理論的に既知の場合は問題がなく、コンピュータビジョンにおける **DLT (direct linear**

transformation) 法に対応している。一方、その写像が理論的に不明な場合には、写像が先か構造が先かという鶏と卵の問題が生じる。しかしデータの構造を十分に近似できる写像が求めれば良いならば、多数の基底で表現される非常に高次元への写像を考えることにより鶏と卵の問題は近似的に解決される。

一般に、高次元写像を考えると、データの写像先である高次元ベクトルの計算量が多くなる。この問題を解決したのがカーネルトリック^{1),14)} であり、NLPCA を行う際に必要なものは非線型写像そのものではなく、写像先におけるデータの内積に相当する対称な正定値カーネル関数で十分というものである。このことにより写像先がどんなに高次元であってもデータ数のみが計算量にかかわることになる。このように問題のすり替えを行なうのでトリックと呼ばれる。このカーネルトリックを用いて NLPCA を行なう手法は **核主成分分析 (kernel PCA ; KPCA)**¹²⁾ と呼ばれている。ここで KPCA において、核関数の決定は入力空間におけるデータ点にあてはめるべき曲線群や曲面群 (を表現する特徴写像) を決定することと同じである。

さて、PCA とはデータを表現する座標枠を変換しデータの構造をより良く表現する順に新しい座標枠を作り直すことと解釈できる。この観点からすると通常の PCA は座標枠の合同変換 (重みつき PCA はアフィン変換) により新たな欧氏座標枠を取り直し、NLPCA は新たな曲線座標枠を取り直すことに相当す

[†] 産業技術総合研究所
National Institute of Advanced Industrial Science and Technology

る。つまり NLPCA は曲線座標軸からなる曲線や曲面のあてはめ問題であり、データ点列にあてはめるべき曲線や曲面と NLPCA を行なう際に考える写像が対応する。そして DLT 法による 2 次曲線等のあてはめ問題は NLPCA であり、あてはめられた曲線や曲面は、与えられたデータの**主成分曲線 (principle curve)** や**主成分曲面 (principle surface)** である。

さて、KPCA¹²⁾ や DLT 法は、入力空間の写像先である**特徴空間 (feature space)** における欧氏距離の LS 基準によるあてはめ問題である。そのため、このあてはめ結果による入力データの推定値は、特徴空間においてのあてはめ結果への最短距離であり、入力空間においては、あてはめ結果への最短距離とはならないのが一般的である。そこで、コンピュータビジョンでは、曲線や曲面をあてはめ問題において入力空間における距離の LS 基準 (誤差がガウス分布に従う仮定) によるあてはめ問題が研究されてきた^{2),4),9)~11),13)}。これらの手法は実質的に同じ近似関数から出発する。

その一方で球面上で曲線をあてはめる問題も研究されてきた。球面上の測地線に沿う距離の二乗和を最小にする**球面最小二乗 (Spherical least squares; SLS)** 基準により 2 次元単位球面 S^2 に小円をあてはめる手法⁸⁾ が提案された。この手法は SLS を近似せずに反復的に解いているが、あてはめる対象が小円に限られる。この手法は 1 次元低い超球面をあてはめる手法に簡単に拡張できるが、2 次元以上低い超球面を直接あてはめることはできない。そこで極射影が円々対応をもつことに着目し、超球面を欧氏空間に極射影し、射影空間においてデータ点に**ヤコビ行列式 (Jacobian determinant)** から計算される重みを用いた重みつき LS に帰着して SLS を近似的に解く計量の**ユークリッド化 (欧氏化; Euclideanization)**⁵⁾ が提案された。この計量の欧氏化を用いて、反復解法によらず、欧氏空間における重みつき PCA で球面データの NLPCA を近似する手法を**球面主成分分析 (Spherical PCA; SPCA)**⁶⁾ と呼ぶ。また、緯度と経度を座標とする助変数を含む曲線の SLS 基準によるあてはめ問題を**ヤコビ行列 (Jacobian matrix)** を利用して線型近似する手法⁷⁾ も提案されている。

そこで本稿では、データとあてはめる空間との誤差を KPCA¹²⁾ で用いられている特徴空間における欧氏誤差 (代数的誤差) から入力空間における欧氏誤差へと変更する。その際、欧氏誤差を正確に計算するのは難しいので欧氏誤差の近似値を用いることにする。

この提案手法を**ヤコビ核主成分分析 (Jacobian KPCA; JKPCA)** と呼ぶ。

2. 問題設定

一般的に、 m 次元空間の点列に曲線や曲面をあてはめる際、この点列を n 次元ヒルベルト空間 \mathcal{H} に写像し、 \mathcal{H} における線型あてはめに帰着することが多い。この線型あてはめ問題において、 \mathcal{H} における最小二乗基準で推定を行うと固有値問題に帰着できるため、容易に解くことができる。これら一連の手続きはカーネル法として知られている。しかし、入力空間がそれ自体うまく設計されたヒルベルト空間であって、自然な計量が入っている場合、特徴空間における計量を基準として推定を行うことは好ましいことではないと考えられる³⁾。

そこで本稿では入力空間の計量における LS 基準で曲線や曲面をあてはめる学習アルゴリズムを近似的に解決する手法を提案する。ここで、入力空間においてデータ点からあてはめるべき曲線への垂線の足は陽に求められない上に、一般に垂線の足^{*}は一意とは限らないため、厳密な意味で LS 基準による曲線や曲面のあてはめ問題を解くのは非常に難解であり、一般的には最小値に近いであろう極小解を求めていることが多いことに注意しておく。

2.1 入力空間の計量と特徴空間の計量

入力空間を m 次元リーマン空間とし、この空間上の座標を \mathbf{x} である点におけるリーマン計量を $G_{\mathbf{x}}$ とする。また、観測されたノイズを含むと考えられるデータ点を $\mathbf{x}_{[1]}, \dots, \mathbf{x}_{[D]}$ とする。本稿の定式化ではデータ点 $\mathbf{x}_{[d]}$ 附近の空間は計量が $G_{\mathbf{x}_{[d]}}$ で一定となるアフィン空間で近似され、 $\mathbf{x} = \mathbf{x}_{[d]} + \delta\mathbf{x}$ なる点 \mathbf{x} とデータ点 $\mathbf{x}_{[d]}$ の距離 r^p について

$$(r^p)^2 = (\delta\mathbf{x})^\top G_{\mathbf{x}_{[d]}} (\delta\mathbf{x})$$

で近似されるとする。

さて、入力空間の点 \mathbf{x} を n 次元ヒルベルト空間である特徴空間に特徴写像 $\phi: \mathbf{x} \mapsto \phi(\mathbf{x})$ で射影する。ここで特徴写像 ϕ のヤコビ行列 J_ϕ 及び計量テンソル G_ϕ を

$$J_\phi = \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}}, \quad G_\phi = J_\phi^\top J_\phi$$

とする。今、 $\phi(\mathbf{x})$ が微小変化して $\phi(\mathbf{x} + \delta\mathbf{x}) = \phi(\mathbf{x}) + \delta\phi$ になったとき、

$$\delta\phi(\mathbf{x}) = J_\phi \delta\mathbf{x}, \quad \delta\mathbf{x} = J_\phi^+ \delta\phi(\mathbf{x})$$

* ある点から曲線に対して測地線に沿う距離が最小となるような測地線を**垂線**と呼び、測地線に沿う距離が最小となるような点を**垂線の足**と呼ぶ。

(X^+ は X のムーア・ペンローズ逆行列) だから

$$(r^p)^2 = (\delta\phi(\mathbf{x}))^\top \mathcal{G}_\phi \delta\phi(\mathbf{x})$$

が成立する。ここで $\mathcal{G}_\phi = (J_\phi^+)^\top G_{\mathbf{x}_{[d]}} J_\phi^+$ であり、このとき、 $\mathcal{G}_\phi^{-1} = J_\phi G_{\mathbf{x}_{[d]}}^{-1} J_\phi^\top$ が成立する。

3. 特徴空間における線型あてはめ

観測されたデータ点の特徴空間における表現

$\phi_{[d]} = \phi(\mathbf{x}_{[d]})$ ($d = 1, \dots, D$) に対して $n-1$ 次元アフィン空間 $\mathbf{a}^\top \phi + b = 0$ をあてはめる。

点 $\phi_{[d]}$ の真値を $\hat{\phi}_{[d]}$ ($d = 1, \dots, D$) とし、 $\hat{\phi}_{[d]} - \phi_{[d]} = \delta\phi_{[d]}$ とすると、

$$\mathbf{a}^\top \hat{\phi}_{[d]} + b = \mathbf{a}^\top \phi_{[d]} + \mathbf{a}^\top \delta\phi_{[d]} + b = 0,$$

つまり $\mathbf{a}^\top \delta\phi_{[d]} = -(\mathbf{a}^\top \phi_{[d]} + b)$ が成立する。

よって条件

$$\mathbf{a}^\top [\delta\phi_{[d]} \delta\phi_{[d]}^\top] \mathbf{a} = (\mathbf{a}^\top \phi_{[d]} + b)^2$$

における

$$(r_{[d]})^2 = (\delta\phi(\mathbf{x}))^\top \mathcal{G}_{\phi_{[d]}} \delta\phi(\mathbf{x})$$

の最小値

$$\min (r_{[d]})^2 = \frac{(\mathbf{a}^\top \phi_{[d]} + b)^2}{\mathbf{a}^\top \mathcal{G}_{\phi_{[d]}}^{-1} \mathbf{a}}$$

を用いて構成される評価関数

$$\mathcal{E}(\mathbf{a}) = \sum_{d=1}^D \frac{(\mathbf{a}^\top \phi_{[d]} + b)^2}{\mathbf{a}^\top \mathcal{G}_{\phi_{[d]}}^{-1} \mathbf{a}} \quad (1)$$

を最小にする \mathbf{a} , b を求めれば良い。もちろん式(1)を b で微分して b を求め、式(1)に代入した後に \mathbf{a} を求めても良いが、ここでは $\tilde{\phi} = (\phi^\top \ 1)^\top$, $\tilde{\mathbf{a}} = (\mathbf{a}^\top \ b)^\top$ と置いて $n+1$ 次元空間の原点を通る n 次元線型部分空間 $\tilde{\mathbf{a}}^\top \tilde{\phi} = 0$ の推定問題に帰着させる、つまり

$$\mathcal{E}(\tilde{\mathbf{a}}) = \sum_{d=1}^D \frac{\tilde{\mathbf{a}}^\top [\tilde{\phi}_{[d]} \tilde{\phi}_{[d]}^\top] \tilde{\mathbf{a}}}{\tilde{\mathbf{a}}^\top \tilde{\mathcal{G}}_{\phi_{[d]}}^+ \tilde{\mathbf{a}}} \quad (2)$$

の最小にする $\tilde{\mathbf{a}}$ を求める^{2),9),13)}。ここで

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\phi_{[d]}} = \begin{pmatrix} \mathcal{G}_{\phi_{[d]}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^\top & 0 \end{pmatrix}$$

である。式(2)の最小化を核関数を用いて行なう。

4. 核関数による表現

本稿では、核関数として微分可能なものを考え、核関数 $k(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \phi(\mathbf{x})^\top \phi(\mathbf{y})$ だけでなく、その微分

$$\mathbf{k}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{\partial k(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\partial \mathbf{x}^\top} = J_\phi(\mathbf{x})^\top \phi(\mathbf{y})$$

も用いる。これをヤコビ核 (Jacobian kernel) と呼ぶ。また \mathbf{a} の存在範囲として $\phi_{[d]}$ の線型結合

$$\mathbf{a} = \sum_p \alpha_{[d]} \phi_{[d]} = \Phi \alpha$$

だけを考える^{*}。ここで $D \times D$ 行列 \mathcal{K} を

$$(\mathcal{K})_{ij} = k(\mathbf{x}_{[i]}, \mathbf{x}_{[j]}),$$

$$\mathcal{K} = (\mathcal{K}_{[1]} \ \dots \ \mathcal{K}_{[D]})$$

で定義し、また、 $D \times m$ 行列 $\mathcal{K}_{[d]}$ を

$$\mathbf{k}_{[i][j]} = k(\mathbf{x}_{[i]}, \mathbf{x}_{[j]}),$$

$$\mathcal{K}_{[d]} = (\mathbf{k}_{[d][1]} \ \dots \ \mathbf{k}_{[d][D]})^\top$$

で定義すると、

$$\mathcal{K}_{[d]} = \Phi^\top \phi_{[d]}, \quad \mathcal{K}_{[d]} = \Phi^\top J_\phi(\mathbf{x}_{[d]})$$

が成立する。このとき、式(2)について

$$\tilde{\mathbf{a}}^\top [\tilde{\phi}_{[d]} \tilde{\phi}_{[d]}^\top] \tilde{\mathbf{a}} = \alpha^\top \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top \alpha,$$

$$\tilde{\mathbf{a}}^\top \tilde{\mathcal{G}}_{\phi_{[d]}}^+ \tilde{\mathbf{a}} = \alpha^\top \mathcal{K}_{[d]} \tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{x}_{[d]}}^+ \mathcal{K}_{[d]}^\top \alpha$$

である。ここで

$$\tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{x}_{[d]}} = \begin{pmatrix} G_{\mathbf{x}_{[d]}} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0}^\top & 0 \end{pmatrix}$$

である。このとき式(2)は、写像 ϕ を含まない

$$\mathcal{E}'(\alpha) = \sum_{d=1}^D \frac{\alpha^\top \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top \alpha}{\alpha^\top \mathcal{K}_{[d]} \tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{x}_{[d]}}^+ \mathcal{K}_{[d]}^\top \alpha} \quad (3)$$

となり、これを最小にする α を求めることとなる。

4.1 解法とアルゴリズム

式(3)の最小化アルゴリズム²⁾を紹介する。 α の近似値 α_0 が得られたとき、

$$\mu_{[d]}^{[0]} = (\alpha^{[0]})^\top \mathcal{K}_{[d]} \tilde{\mathcal{G}}_{\mathbf{x}_{[d]}}^+ \mathcal{K}_{[d]}^\top (\alpha^{[0]})$$

とするとエネルギー関数 $\mathcal{E}'(\alpha)$ は

$$\mathcal{E}'(\alpha) \approx \alpha^\top \left(\sum_{d=1}^D \frac{1}{\mu_{[d]}} \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top \right) \alpha$$

と近似でき、これを最小にする α は行列

$$\sum_{d=1}^D \frac{1}{\mu_{[d]}} \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top$$

の最小固有値に対応する固有ベクトルとなることを利用する。以下のアルゴリズムにおいて右肩の $[k]$ によ

* 赤穂³⁾ は $\mathbf{a} = \Phi \alpha + \sum_{d=1}^D \beta_{[d]}^\top \left(\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}} \right)_{[d]}^\top$ の範囲で \mathbf{a} を探索し、そのため $\mathbf{K}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = J_\phi(\mathbf{x})^\top J_\phi(\mathbf{y})$ も定義される。この核関数を計量核 (metric kernel) と名付ける。

て k ステップ目の値を表すものとする。初期値は右肩が [0] となる (初期値の設定は後述)。

- (1) 初期値 $\mu_{[d]}^{[0]}$ ($d = 1, \dots, D$) の設定
- (2) 収束するまで (a), (b) を繰り返す

- (a) $\sum_{d=1}^D \frac{1}{\mu_{[d]}^{[k]}} \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top$ の最小固有値に対応する単位固有ベクトル $\hat{\alpha}^{[k+1]}$ を求める。
- (b) $\mu_{[d]}^{[k+1]} := (\hat{\alpha}^{[k+1]})^\top \mathcal{K}_{[d]} G_{\mathbf{x}_{[d]}}^+ \mathcal{K}_{[d]}^\top (\hat{\alpha}^{[k+1]})$ によって $\mu_{[d]}$ を更新 ($d = 1, \dots, D$) 。

4.2 初期値

本稿では3つの初期値を検討する。1つ目は $\mu_{[d]}^{[0]} = 1$ ($d = 1, \dots, D$) とおく²⁾ KPCA で近似した

$$\mathcal{E}'(\alpha) \approx \alpha^\top \left(\sum_{d=1}^D \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top \right) \alpha = \alpha^\top \mathcal{K}^2 \alpha$$

である。2つ目は球面に対して提案された欧氏化⁵⁾ を一般化したもので、

$$\mathbf{a}^\top \mathcal{G}_{\phi_{[d]}}^{-1} \mathbf{a} \approx (\det \mathcal{G}_{\phi_{[d]}}^{-1})^{\frac{2}{m}} (\mathbf{a}^\top \mathbf{a})$$

と近似するものである。これを核関数で表現すると

$$\mathcal{E}'(\alpha) \approx \alpha^\top \left(\sum_{d=1}^D \frac{\mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top}{(\det \mathcal{G}_{\phi_{[d]}}^{-1})^{\frac{2}{m}}} \right) \alpha$$

となり、 m 次元体積要素の変化率を加味した重み付き核主成分分析である。3つ目は Taubin 法¹³⁾ である、

$$\mathcal{E}'(\alpha) \approx \frac{\alpha^\top \left(\sum_{d=1}^D \mathcal{K}_{[d]} \mathcal{K}_{[d]}^\top \right) \alpha}{\alpha^\top \left(\sum_{d=1}^D \mathcal{K}_{[d]} G_{\mathbf{x}_{[d]}}^+ \mathcal{K}_{[d]}^\top \right) \alpha}$$

なる近似で、 α は一般化固有値問題

$$\mathcal{K}^2 - \lambda \left(\sum_{d=1}^D \mathcal{K}_{[d]} G_{\mathbf{x}_{[d]}}^+ \mathcal{K}_{[d]}^\top \right)$$

の最小固有値に対応する固有ベクトルである。

5. ヤコビ核主成分分析

前節のアルゴリズムの収束時 (∞ ステップ目) は $\Lambda = \text{diag}\{\mu_{[1]}, \dots, \mu_{[D]}\}$ とすると、

$$\mathcal{E}'(\alpha)^{[\infty]} = (\mathbf{a}^{[\infty]})^\top \Phi(\Lambda^{[\infty]})^{-1} \Phi^\top \mathbf{a}^{[\infty]}$$

の最小固有値を求めることと同等であり、対称行列 $\Phi(\Lambda^{[\infty]})^{-1} \Phi^\top$ の固有ベクトルについて考えていることになる。つまり特徴ベクトル $\phi_{[d]}$ に対して重み $(\mu_{[d]}^{[\infty]})^{-\frac{1}{2}}$ を与えたときの重みつき主成分分析を行なっていることに対応しており、対称行列 $\Phi(\Lambda^{[\infty]})^{-1} \Phi^\top$ の固有値が小さい順に固有ベクトルを並べたものが核

主成分分析における主成分を大きい順に並べたものとなる。ここで $\mu_{[d]} = \|J_{\phi_{[d]}}^\top \mathbf{a}\|_{G_{\mathbf{x}_{[d]}}^+}^2$ であるから、データ点 $\mathbf{x}_{[d]}$ 附近の計量と $\phi_{[d]}$ 附近の計量を比べ、 $\phi_{[d]}$ 附近に局所的に入力空間の計量を反映させた重みつき主成分分析がヤコビ核主成分分析で、この重みを反復計算によって求めるのが提案アルゴリズムである。

6. 核主成分分析の応用

6.1 2次元平面上の n 次曲線あてはめ

2次元平面は欧氏空間より $G\mathbf{x} = \mathbf{I}_m$ である。例えば2次元平面上の2次曲線のあてはめ問題は、2次曲線が同次座標 $\tilde{\mathbf{x}} = (\mathbf{x}^\top \ 1)^\top$ を用いて

$$\tilde{\mathbf{x}}^\top \begin{pmatrix} a & b & c \\ b & d & e \\ c & e & f \end{pmatrix} \tilde{\mathbf{x}} = 0$$

という形で表現される。そこで

$$\mathbf{a} = (a \ b \ d \ c \ e \ f)^\top,$$

$$\phi(\mathbf{x}) = (x^2 \ 2xy \ y^2 \ 2x \ 2y \ 1)^\top$$

とおくと $\mathbf{a}^\top \phi(\mathbf{x}) = 0$ となるので、この $\phi(\mathbf{x})$ に基づいて核関数を構成しても良いが、

$$\mathbf{a} = (a \ b/\sqrt{2} \ d \ c/\sqrt{2} \ e/\sqrt{2} \ f)^\top,$$

$$\phi(\mathbf{x}) = (x^2 \ \sqrt{2}xy \ y^2 \ \sqrt{2}x \ \sqrt{2}y \ 1)^\top$$

と置き直しても $\mathbf{a}^\top \phi(\mathbf{x}) = 0$ が成立するので、これらの $\phi(\mathbf{x})$ に基づいて核関数を構成する。このとき

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\mathbf{x}_1^\top \mathbf{x}_2 + 1)^2 = (\tilde{\mathbf{x}}_1^\top \tilde{\mathbf{x}}_2)^2,$$

$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = 2\mathbf{x}_2^\top \tilde{\mathbf{x}}_1 \tilde{\mathbf{x}}_2$ と多項式核でうまく表現可能である。一般に、 n (≥ 2) 次曲線をあてはめるには n 次多項式核関数 $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (\tilde{\mathbf{x}}_1^\top \tilde{\mathbf{x}}_2)^n$ 、

$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = (n-1)\mathbf{x}_2^\top (\tilde{\mathbf{x}}_1 \tilde{\mathbf{x}}_2)^{n-1}$ を用いれば良い。

6.2 球面上の曲線あてはめ

球面上の緯度経度を座標とする助変数表現される曲線のあてはめ⁷⁾ も JKPCA である。

球面 S^2 上の緯度 ϕ 、経度 ψ を座標とする点列

$\mathbf{x}_{[d]} = (\phi_{[d]}, \psi_{[d]})^\top$ に対して助変数 \mathbf{a} で記述される曲線群 $f(\mathbf{x}; \mathbf{a}) = \mathbf{a}^\top \phi(\mathbf{x}) = 0$ のあてはめは式 (3) で

$$G\mathbf{x} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \sin^2 \phi \end{pmatrix} \text{ とすれば良い。}$$

6.3 エヒポロー幾何学

第 i 画像と第 j 画像の対応する第 p 特徴点をそれぞれ \mathbf{x}_{ip} 、 \mathbf{x}_{jp} とし、 $\mathbf{x}_p = (\mathbf{x}_{ip}^\top \ \mathbf{x}_{jp}^\top)^\top$ とし、特徴画像を $\phi(\mathbf{x}_p) = \tilde{\mathbf{x}}_{ip} \otimes \tilde{\mathbf{x}}_{jp}$ (\otimes はクロネッカー積) と定めれば基礎行列 F に対して $(csF)^\top \phi(\mathbf{x}_p) = 0$ (cs は行列の列展開) が成立する。このとき核関数は

$$k(\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_q) = (\tilde{\mathbf{x}}_{ip}^\top \tilde{\mathbf{x}}_{iq})(\tilde{\mathbf{x}}_{jp}^\top \tilde{\mathbf{x}}_{jq}),$$

$$k(\mathbf{x}_p, \mathbf{x}_q) = \mathbf{x}_q (\tilde{\mathbf{x}}_{jp}^\top \tilde{\mathbf{x}}_{jq}).$$

7. 実験

放物線 $y = x^2$ 上の点を x 座標が区間 $[-3, 3]$ からの一様分布に従うように 50 点生成し、各点に平均 0、分散 0.04 のガウスノイズを加えた人工データに 2 次曲線をあてはめるシミュレーションを、提案手法 (JKPCA) の有効性を示すために行なった。

7.1 JKPCA の評価関数と実距離

図 1 は JKPCA による近似距離と実距離の比較で、上は 2 乗和の反復回数による変化、下は収束時の各データにおける比較である。初期段階では実距離と近似距離の差は大きいですが、収束するに従って両者の差は縮まり、収束時にはデータがほぼ斜線の上に分布し (図 1 下) 実距離と近似距離がほとんど同じとなる。

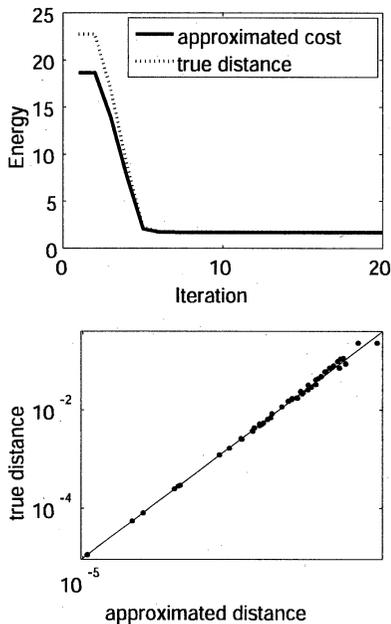


図 1 JKPCA の近似距離と実距離：反復回数 (上)、収束時 (下)

7.2 同等な特徴写像による推定結果の違い

2 次曲線のあてはめ問題において 2 つの特徴写像 $\phi(x) = (x^2 \ 2xy \ y^2 \ 2x \ 2y \ 1)^T$ (DLT 法で用いられる形なので図では DLT と表記)、 $\phi(x) = (x^2 \ \sqrt{2}xy \ y^2 \ \sqrt{2}x \ \sqrt{2}y \ 1)^T$ (多項式核なので図では polynomial kernel と表記) における推定結果を比較した。これら特徴写像は基底の重みが異なるだけであてはめ可能な曲線群は完全に一致する。図 2 はデータ点と曲線の距離を比較したもので、図の斜線において DLT 法と多項式核の両方の

推定結果に対する距離が等しくなる。上が KPCA、下が JKPCA の結果であるが、KPCA に比べ、JKPCA の場合は DLT 法と多項式核の推定結果がほとんど同じ (点がほぼ斜線の上に分布している) であり、データ点と曲線の距離も小さくなっていることがわかる。つまり、KPCA の場合は特徴写像に推定結果が大きく依存するが、JKPCA の場合は入力空間の計量に依存して推定を行なっているため特徴写像に推定結果がほとんど依存しないことがわかる。

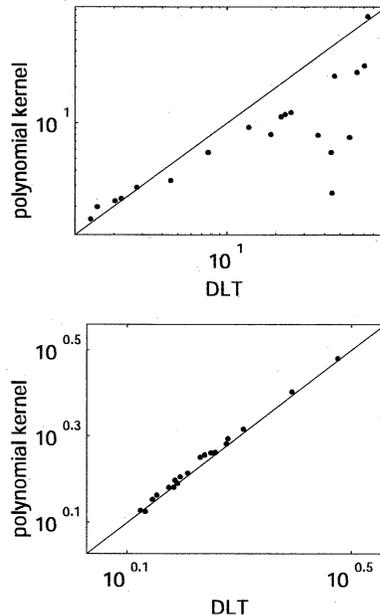


図 2 曲線との距離の比較：KPCA (上)、JKPCA (下)

7.3 KPCA vs JKPCA

2 次曲線のあてはめ問題における KPCA と JKPCA の推定結果を比較した。ここで核関数として多項式核 $k(x_1, x_2) = (\tilde{x}_1^T \tilde{x}_2)^2$ を用いた。図 3 は曲線の推定結果である。KPCA の場合、特徴空間における誤差を最小化するため、入力空間においては誤差の大きな曲線があてはまっていることがわかる。

7.4 初期値の比較

前小節より KPCA のあてはめが良くないので KPCA を初期値として用いるのは不利である。そこで欧氏化と Taubin 法を比較する。図 4 は欧氏化と Taubin 法及び JKPCA を比較した結果である。図 4 から、欧氏化と Taubin 法は初期値として実質差があまりなく、また欧氏化と JKPCA も実質差があまりないことがわかる。このことから、欧氏化や Taubin 法

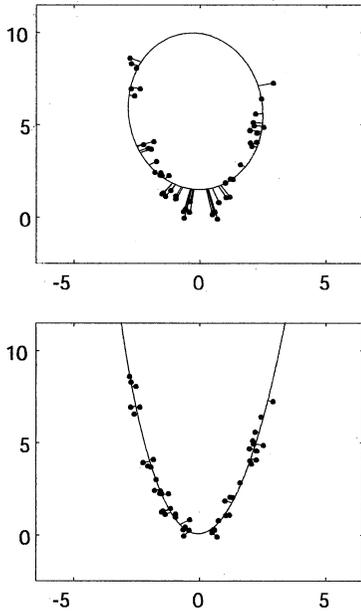


図3. あてはめ結果: KPCA (上), JKPCA (下)

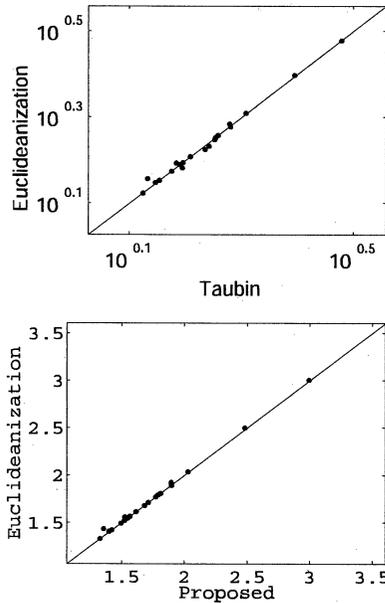


図4. 欧氏化 vs Taubin 法 (左), JKPCA (右)

は本実験の範囲内では推定結果として代用できる程度に精度良い初期値であると考えることができ、退化した行列の一般化固有値問題となる Taubin 法に比べ、単なる重みつき主成分分析である欧氏化は精度良い初期値を求めるのに都合が良いと考えることができる。

参考文献

- 1) M. Aizerman, É. Braverman and L. Rozonoér, "Theoretical foundations of the potential function method in pattern recognition learning," *Automation and Remote Control*, **25**:821-837, 1964.
- 2) S. Akaho, "Curve fitting that minimizes the mean square of perpendicular distances from sample points," *SPIE, Vision Geometry II*, 1993.
- 3) 赤穂昭太郎, "入力空間でのマージンを最大化するサポートベクタマシン," *信学論 D-II*, **J86-D-II(7)**:934-942, 2003.
- 4) W. Chojnacki, M. j. Brooks, A. van den Hangel and D. Gawley, "On the fitting of surface to data with covariances," *IEEE TPAMI*, **22(11)**:1294-1303, 2000.
- 5) 藤木淳, 赤穂昭太郎, "球面上の点列への小円あてはめ~カメラ運動の平滑化に向けて~, " *信学技報 PRMU2004-149*:91-96, 2004(12).
- 6) J. Fujiki and S. Akaho, "Spherical PCA with Euclideanization," *Subspace 2007(ACCV07)*.

- 7) 藤木淳, 赤穂昭太郎, "球面最小二乗法による球面上の曲線あてはめ," *Subspace 2008(MIRU2008)*.
- 8) N. H. Gray, P. A. Geiser and J. R. Geiser, "On the least-squares fit of small and great circles to spherically projected orientation data," *Mathematical Geology*, **12(3)**:173-184, 1980.
- 9) 金谷健一, 菅谷保之, "幾何学的あてはめの厳密な最尤推定の統一的計算法," *情処研報*, 2008-CVIM-164-3:17-24, 2008.
- 10) Y. Leeden and P. Meer, "Heteroscedastic regression in computer vision: problems with bilinear constraint," *IJCV*, **37(2)**:127-150, 2000.
- 11) P. D. Sampson, "Fitting conic sections to 'very scattered' data: an iterative refinement of the Bookstein algorithm," *Comput. Vision, Graphics, and Image Processing*, **18**:97-108, 1982.
- 12) B. Schölkopf, A. Smola and K.-R. Müller, "Non-linear component analysis as a kernel eigenvalue problem," *Neural Computation*, **10**:1299-1319, 1998.
- 13) G. Taubin, "Estimation of planar curves, surfaces, and nonplanar space curves defined by implicit equations with applications to edge and range image segmentation," *IEEE TPAMI*, **13(11)**:1115-1138, 1991.
- 14) V. Vapnik, *The Nature of Statistical Learning Theory*, Springer-Verlag, 1995.