グラフィクスとCAD　48－7
（1990. 12. 14）

拡張されたＦｉｓｈｅｒ比に基づく直交判別分析

浜本義彦　　金岡泰保　　富田真吾

山口大学　工学部

あらまし　代表的な特徴抽出法として知られている判別分析は、評価関数であるFisher比を最大にする特徴軸を抽出するもので、得られる特徴軸が無相関系をなすという長所を有する。しかしながら、判別分析には①クラス数により特徴軸数に制約を受ける、②Fisher比が共分散行列の差異を識別情報として考慮に入れていない、という問題点がある。これらの問題点を克服する一手法として、FehlauerとEisensteinにより新しいFisher比に基づく特徴抽出法（F-E法）が提案された。しかしながら、F-E法には、逆行列計算を含む二つの固有値問題を解かなければならないという問題点がある。本論文では、Fehlauerらにより提案されたFisher比の有効性に着目し、F-E法の問題点を解消する直交判別分析を提案する。まず、ある種の前変換によりパターン空間の正規化を行い、正規化空間では①F-E法は直交系を生成する、②固有値問題に逆行列計算が含まれていない、ということを示す。次に、正規化空間においてF-E法より識別能力の高い特徴軸を抽出する手法を提案する。最後に、数値例から本手法の有効性を示す。

Orthogonal discriminant analysis based on an extended Fisher ratio

Yoshihiko Hamamoto　　Taiho Kanaoka　　Shingo Tomita

Faculty of Engineering, Yamaguchi University, Ube, 755, Japan

Abstract Orthogonal discriminant analysis based on an extended Fisher ratio is proposed. The classical discriminant analysis has two serious limitations. First, the maximum number of features which can be extracted is M-1, where M is the number of pattern classes. The second limitation of the classical discriminant analysis is that the Fisher ratio, which it maximizes, does not take into consideration the difference of class covariance matrices. To extend the Fisher ratio, Fehlauer and Eisenstein present a new Fisher ratio, which is called the declustering criterion. The F-E method baesd on the extended Fisher ratio overcomes the above limitations. From the point of view of computational complexity, however, the F-E method requires the inversion of matrices. We introduce a transformation, which is called the whitening transformation, in order to overcome the shortcoming. In the transformed space, there is no matrix inversing problem. Moreover, the F-E method produces an orthonormal coordinate system. Finally, we propose a new method which is more powerful than the F-E method in terms of the extended Fisher ratio.

1．まえがき

パターン認識における特徴抽出系の目的は、認識対象より観測された大量データの中から識別に有用な少数の特徴を抽出することにある。代表的な特徴抽出法の一つに判別分析がある[1]。判別分析は評価関数であるFisher比を最大にする特徴軸を抽出するもので、得られる特徴軸が無相関系をなすということが知られている。無相関系は、多変量解析における基本的な座標系であり、特徴軸上に射影されて得られる特徴量が統計的に無相関であるためデータ圧縮の観点から望ましい座標系である。更に、正規分布を仮定した場合統計的に独立な特徴量が得られるという長所を有する。しかしながら、判別分析には次のような問題点が指摘されている[2]。第一の問題点は判別分析がクラス数により特徴軸数に制約を受けるということである。すなわち、mクラス問題ではm－1個の特徴軸しか得られない。これはFisher比を構成しているクラス間共分散行列の階数がm－1であることによる[12]。第二の問題点は、Fisher比が共分散行列の差異を識別情報として考慮に入れていないということである。従って2クラスの平均ベクトルが一致するような分布では無力となる。いずれの問題点も特徴評価関数であるFisher比に起因する。上述の二つの問題点を解消する一手法として、Malina[3]は共分散行列の差異を考慮に入れたFisher比を定義し、それに基づく特徴抽出法を提案した。岡田と富田は、Malinaの提案したFisher比の有効性に着目し、Malina法を特徴軸の直交性という立場から改善した[4]。しかしながら、いずれの手法も得られる座標系は無相関系ではない。

一方Malinaとは異なる立場から、FehlauerとEisenstein（F-E法）は共分散行列の差異を分散比という形で表したFisher比に基づく特徴抽出法を提案した[5]。これは、Malina法と同様特徴軸数の制約問題を解消するもので代表的な特徴抽出法であるFoleyとSammonの手法[6]より低いエラー確率を与える特徴空間を生成するということが実験結果から示された[5]。しかしながら、F-E法には特徴軸を求めるため逆行列計算を含む二つの固有値問題を解かなければならないという問題点がある。また、F-E法から得られる座標系が一般に斜交系であるため、特徴空間においてなされる標準パターンと入力パターンとの間の距離計算などが直交系に比べ簡単ではない。

本論文では、FehlauerとEisensteinにより提案されたFisher比の有効性に着目し、F-E法の問題点を解消する直交判別分析を提案する。Malina法を改良した岡田-富田法と比べ、本手法は得られる特徴軸が直交系でかつ無相関系をなすという長所を有する。2．では、F-E法を述べ、F-E法から得られる特徴軸が無相関系をなすことを明らかにする。3．では、ある種の前変換によりパターン空間の正規化を行い、まず①正規化空間では固有値問題に逆行列計算が含まれていない、②正規化空間ではF-E法が直交系を生成する、③前変換によってもF-E法のFisher比は不変に保たれ、無相関性も保存される、ということを示す。次に、F-E法は一般に二つの固有値問題を解かなければならないが、これら二つの固有値問題間の関係を論じる。4．では、F-E法より識別能力の高い特徴軸を抽出する手法を提案し、その有効性を数値例から示す。

2．F-E法

2.1 拡張されたFisher比

n次元パターン空間をR^nと表す。拡張されたFisher比は次式で定義される。

$$J_1(\boldsymbol{a}) = \frac{\boldsymbol{a}^T(B^* + W_2^*)\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}^T W_1^* \boldsymbol{a}} \qquad (1)$$

$$J_2(\boldsymbol{b}) = \frac{\boldsymbol{b}^T(B^* + W_1^*)\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{b}^T W_2^* \boldsymbol{b}} \qquad (2)$$

ここで、

$\boldsymbol{a}$、$\boldsymbol{b}$：パターンが射影されるn次元ベクトル
N_i：クラスiのパターン数
$N = N_1 + N_2$：全パターン数
$p(i) = N_i / N$：クラスiの事前確率
$\boldsymbol{\mu}_i^*$：クラスiの平均ベクトル
$\boldsymbol{\mu}^* = p(1)\boldsymbol{\mu}_1^* + p(2)\boldsymbol{\mu}_2^*$：全平均ベクトル
Σ_i^*：クラスiの共分散行列
$W_i^* = p(i)\Sigma_i^*$：クラスiの重み付き共分散行列
$B^* = p(1)p(2)(\boldsymbol{\mu}_1^* - \boldsymbol{\mu}_2^*) \cdot (\boldsymbol{\mu}_1^* - \boldsymbol{\mu}_2^*)^T$：クラス間共分散行列

Σ_i^*、i =1,2を正定値行列と仮定する。B^*は一般に半正定値行列である。F-E法は、上述のFisher比を最大にする特徴軸$\boldsymbol{c}_k$を求めるものである。r次元特徴空間を生成するr個の特徴軸は、次の固有値問題

$$W_1^{*-1}(B^* + W_2^*)\boldsymbol{a}_i^* = \lambda_i^* \boldsymbol{a}_i^*$$
$$\lambda_1^* \geqq \cdots \geqq \lambda_n^* \qquad (3)$$
$$W_2^{*-1}(B^* + W_1^*)\boldsymbol{b}_i^* = \rho_i^* \boldsymbol{b}_i^*$$
$$\rho_1^* \geqq \cdots \geqq \rho_n^* \qquad (4)$$

を解いて得られる固有ベクトル$\boldsymbol{a}_i^*$、$\boldsymbol{b}_i^*$の中から次のように選択される。

$$\boldsymbol{c}_k = \begin{cases} \boldsymbol{a}_k^{*}、\text{if} \quad \sum_{m=1}^{r} \lambda_m^{*} \geqq \sum_{m=1}^{r} \rho_m^{*} \\ \boldsymbol{b}_k^{*}、\text{otherwise} \end{cases} \tag{5}$$

ここで、$J_1(\boldsymbol{a}_i^{*}) = \lambda_i^{*}$、$J_2(\boldsymbol{b}_i^{*}) = \rho_i^{*}$に注意されたい。すなわち特徴軸の評価値は対応する固有値である。なお、

$$J_1(t\boldsymbol{a}_i^{*}) = J_1(\boldsymbol{a}_i^{*})$$
$$J_2(t\boldsymbol{b}_i^{*}) = J_2(\boldsymbol{b}_i^{*})$$

から特徴軸の大きさを$\|\boldsymbol{c}_k\| = 1$とする。

拡張されたFisher比を最大にするということは、一つのクラスの分散を一定のもとで他のクラスの分散と平均間の距離を最大にする特徴軸を求めることを意味する。あるクラスの分散を最大にするということから、拡張されたFisher比はDeclustering評価関数と呼ばれる[5]。

2.2 特徴軸の無相関性

F-E法から得られる特徴軸が無相関系をなすことを示そう。無相関な特徴軸とは、相異なる特徴軸$\boldsymbol{d}_i$と$\boldsymbol{d}_k$上にパターン$\boldsymbol{x}$を射影した際、抽出される特徴量$x_i = \boldsymbol{d}_i^T \boldsymbol{x}$と$x_k = \boldsymbol{d}_k^T \boldsymbol{x}$が統計的に無相関にされることをいう。すなわち

$$E[\{x_i - E(x_i)\}\{x_k - E(x_k)\}] = 0 \tag{6}$$

式(6)から

$$\boldsymbol{d}_i^T G^{*} \boldsymbol{d}_k = 0 \tag{7}$$

が得られる。ここで、G^{*}は全共分散行列で

$$G^{*} = B^{*} + W_1^{*} + W_2^{*} \tag{8}$$

なる関係が成立する[7]。従って、式(7)を満たす特徴軸$\boldsymbol{d}_i$と$\boldsymbol{d}_k$のなす系を無相関系と呼ぶ。以上の準備のもと、次の定理が得られる。

［定理1］　F-E法から得られる特徴軸は無相関系をなす。

（証明）$\{\boldsymbol{a}_i^{*}\}$が無相関系をなすことを示す。式(3)から

$$\boldsymbol{a}_k^{*T}(B^{*} + W_2^{*})\boldsymbol{a}_i^{*} = \lambda_i^{*} \boldsymbol{a}_k^{*T} W_1^{*} \boldsymbol{a}_i^{*} \tag{9}$$

$$\boldsymbol{a}_i^{*T}(B^{*} + W_2^{*})\boldsymbol{a}_k^{*} = \lambda_k^{*} \boldsymbol{a}_i^{*T} W_1^{*} \boldsymbol{a}_k^{*} \tag{10}$$

が得られる。式(9)と式(10)とから

$$(\lambda_i^{*} - \lambda_k^{*})\boldsymbol{a}_i^{*T} W_1^{*} \boldsymbol{a}_k^{*} = 0 \tag{11}$$

が得られ、$\lambda_i^{*} \neq \lambda_k^{*}$であるから

$$\boldsymbol{a}_i^{*T} W_1^{*} \boldsymbol{a}_k^{*} = 0 \tag{12}$$

となる。式(8),(10),(12)より

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{a}_i^{*T} G^{*} \boldsymbol{a}_k^{*} \\ &= \boldsymbol{a}_i^{*T}(B^{*} + W_1^{*} + W_2^{*})\boldsymbol{a}_k^{*} \\ &= \boldsymbol{a}_i^{*T} W_1^{*} \boldsymbol{a}_k^{*} + \boldsymbol{a}_i^{*T}(B^{*} + W_2^{*})\boldsymbol{a}_k^{*} \\ &= \lambda_k^{*} \boldsymbol{a}_i^{*T} W_1^{*} \boldsymbol{a}_k^{*} \\ &= 0 \end{aligned} \tag{13}$$

が得られる。$\{\boldsymbol{b}_i^{*}\}$が無相関系をなすことも同様に示すことができる。（証明終）

3. 正規化空間におけるF-E法

3.1 パターン空間の正規化

まず、本論文で重要な役割を果たす前変換を述べる。この前変換によりパターン空間が正規化される。いま、次式で定義される正則な変換行列Aを考える[7]。

$$A = \Phi \Lambda^{-1/2} \tag{14}$$

ここで、

$$\Phi = [\boldsymbol{\beta}_1 \boldsymbol{\beta}_2 \cdots \boldsymbol{\beta}_n]$$

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \sigma_n \end{bmatrix}$$

で、σ_k、$\boldsymbol{\beta}_k$はそれぞれG^{*}の固有値、固有ベクトルである。行列Aを用いてパターンベクトル$\boldsymbol{x}$を次のように変換する。

$$\hat{\boldsymbol{x}} = A^T \boldsymbol{x} \tag{15}$$

ここで、$\hat{\boldsymbol{x}}$は$\boldsymbol{x}$を変換して得られるパターンベクトルである。この変換の施された空間をΩ_nと呼ぶ。すなわち

$$\Omega_n = \{\hat{\boldsymbol{x}} \mid \hat{\boldsymbol{x}} = A^T \boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x} \in R^n\} \tag{16}$$

以下、空間Ω_nにおいて議論を進める。空間Ω_nではG^{*}、B^{*}、W_1^{*}、W_2^{*}はそれぞれ

$$G = A^T G^{*} A = I_n \tag{17}$$

$$B = A^T B^{*} A \tag{18}$$

$$W_i = A^T W_i^{*} A、\ i = 1, 2 \tag{19}$$

で与えられる。ここで、I_nはn次の単位行列である。空間Ω_nでは全共分散行列G^{*}が単位行列に変換されることに注意されたい。

3.2 空間Ω_nにおけるF-E法の諸性質

空間Ω_nでは、まず次の定理が得られる。

［定理2］　空間Ω_nでは、F-E法は直交系を生成する。

（証明）空間Ω_nでは、

$$I_n = B + W_1 + W_2 \tag{20}$$

が成立し、F-E法は

$$W_1^{-1}(B + W_2)\boldsymbol{a}_i = \lambda_i \boldsymbol{a}_i \tag{21}$$

$$W_2^{-1}(B + W_1)\boldsymbol{b}_i = \rho_i \boldsymbol{b}_i \tag{22}$$

なる固有値問題を解いて得られる固有ベクトルを特徴軸とする。式(20)を用いて式(21)を変形すると

$$(B + W_2)\boldsymbol{a}_i = \{\lambda_i / (\lambda_i + 1)\}\boldsymbol{a}_i \tag{23}$$

が得られ、同様にして式(22)から

$$(B + W_1)\boldsymbol{b}_i = \{\rho_i / (\rho_i + 1)\}\boldsymbol{b}_i \tag{24}$$

が得られる。$(B + W_2)$、$(B + W_1)$はいずれも実対称行列であるから、空間Ω_nでは、F-E法は直交系を生成する。　（証明終）

空間Ω_nにおけるF-E法は、式(23)、式(24)のいずれかの固有ベクトルの中から式(5)に従って特徴軸を選択する。ここで、式(23)、式(24)はいずれも逆行列計算を含まない固有値問題であることに注意されたい。更に、文献(8)では式(3),式(4)の固有値は任意の正則な変換のもとで不変であるという結果が報告されている。すなわち、$\lambda_i=\lambda_i^*, \rho_i=\rho_i^*$ $(1\leqq i\leqq n)$。従って、正則行列Aによる前変換によっても拡張されたFisher比は不変に保たれる。また、空間Ω_nでは、全共分散行列が単位行列であることから、任意の直交系は同時に無相関系でもある。次に、二つの固有値問題間の関係を論じる。まず固有値、固有ベクトルに関して次の結果が知られている[9]。

［補題］二つの正定値行列Q_1とQ_2が

$$I_n=Q_1+Q_2 \tag{25}$$

なる関係を満たすとき

$$y_i(Q_1)+y_i(Q_2)=1 \tag{26}$$

$$0<y_i(Q_1)<1 \tag{27}$$

$$0<y_i(Q_2)<1 \tag{28}$$

が成立し、Q_1とQ_2は可換である。ここで、$y_i(Q)$は行列Qのi番目の固有値を表す。

補題より、行列$B+W_2$とW_1の固有ベクトルは一致する。更に、行列$B+W_2$の最大固有値に対応する固有ベクトルは行列W_1の最小固有値に対応する固有ベクトルである。従って、この固有ベクトル上で拡張されたFisher比は最大となる。同様に行列$B+W_1$とW_2の固有ベクトルは一致する。さて、W_1とW_2の固有ベクトルが一致するための必要十分条件はW_1とW_2が可換であることである。従って、上述の二つの固有値問題が一つとなるためにはW_1とW_2が可換であることが必要十分である。

以下、W_1とW_2が可換であるパターン分布の例を示す。空間Ω_nで$\boldsymbol{\mu}_1=\boldsymbol{\mu}_2$の場合、式(20)は

$$I_n=W_1+W_2 \tag{29}$$

となる。このとき、補題よりW_1とW_2は可換である。また、$\Sigma_1=\Sigma_2$なる場合も明らかにW_1とW_2は可換である。

4．最適な直交系

特徴軸数をrとすると、$r\geqq 2$でF-E法は最適な特徴軸の探索が不十分である。ここでは、特徴軸の直交性という立場からこの問題点を解消する特徴抽出法を提案する。

まず、第1特徴軸の抽出について述べる。空間Ω_nにおいて$J_1(\boldsymbol{a})$を最大とするベクトルと$J_2(\boldsymbol{b})$を最大とするベクトルをそれぞれ求め、式(5)に従って評価値の大きい方のベクトルを第1特徴軸とする。すなわち、固有値問題

$$(B+W_2)\,\boldsymbol{a}_i=\alpha_i\boldsymbol{a}_i \tag{30}$$

$$(B+W_1)\,\boldsymbol{b}_i=\beta_i\boldsymbol{b}_i \tag{31}$$

から得られる固有ベクトルの中から第1特徴軸$\boldsymbol{\tau}_1$は

$$\boldsymbol{\tau}_1=\begin{cases}\boldsymbol{a}_1 & \lambda_1\geqq\rho_1 \quad (32)\\ \boldsymbol{b}_1 & \lambda_1<\rho_1 \quad (33)\end{cases}$$

で与えられる。ここで、

$$\lambda_i=\alpha_i/(1-\alpha_i) \tag{34}$$

$$\rho_i=\beta_i/(1-\beta_i) \tag{35}$$

なる関係が成立する。空間Ω_nでは式(20)が成立するので補題から$0<\alpha_i<1$、$0<\beta_i<1$が成立する。このとき、特徴軸$\boldsymbol{\tau}_1$の評価値$J(\boldsymbol{\tau}_1)$は

$$J(\boldsymbol{\tau}_1)=\max(J_1(\boldsymbol{\tau}_1),\ J_2(\boldsymbol{\tau}_1)) =\max(\lambda_1,\ \rho_1) \tag{36}$$

で与えられる。

次に、第2特徴軸の抽出について述べる。第2特徴軸は、第1特徴軸$\boldsymbol{\tau}_1$と直交し、評価関数$J(\boldsymbol{\tau})$を最大にするベクトルである。従って第2特徴軸は、$\boldsymbol{\tau}_1$の直交補空間S^{n-1}において求められることになる。S^{n-1}は、グラム・シュミットの直交化法を用いて次のようなn－1個のn次元正規直交基底$\boldsymbol{\nu}_i$ $(2\leqq i\leqq n)$によって生成される。

$$\boldsymbol{\nu}_i=c_i\left(I_n-\sum_{m=1}^{i-1}\boldsymbol{\nu}_m\boldsymbol{\nu}_m^T\right)\boldsymbol{\phi}_i \tag{37}$$

ここで、$\boldsymbol{\nu}_1=\boldsymbol{\tau}_1$、$\boldsymbol{\phi}_i$は$\boldsymbol{\nu}_m$ $(1\leqq m\leqq i-1)$と一次独立な任意ベクトル、c_iは$\|\boldsymbol{\nu}_i\|=1$とするための正規化定数である。式(37)の$\boldsymbol{\nu}_i$ $(2\leqq i\leqq n)$を用いてΩ_nからS^{n-1}へのn×(n－1)型行列P_1を

$$P_1=[\boldsymbol{\nu}_2\boldsymbol{\nu}_3\cdots\boldsymbol{\nu}_n] \tag{38}$$

とする。S^{n-1}でのB、W_1、W_2はそれぞれ

$$B^{(2)}=P_1^TBP_1 \tag{39}$$

$$W_1^{(2)}=P_1^TW_1P_1 \tag{40}$$

$$W_2^{(2)}=P_1^TW_2P_1 \tag{41}$$

となる。S^{n-1}では

$$I_{n-1}=B^{(2)}+W_1^{(2)}+W_2^{(2)} \tag{42}$$

が成立する。最適特徴軸は次の固有値問題を解くことにより求められる。

$$(B^{(2)}+W_2^{(2)})\,\boldsymbol{a}_i^{(2)} =\alpha_i^{(2)}\boldsymbol{a}_i^{(2)} \tag{43}$$

$$(B^{(2)}+W_1^{(2)})\,\boldsymbol{b}_i^{(2)} =\beta_i^{(2)}\boldsymbol{b}_i^{(2)} \tag{44}$$

ここで、式(42)と補題から$0<\alpha_i^{(2)}<1$、$0<\beta_i^{(2)}<1$である。上式から得られる固有ベクトルの中から評価値の大きさに従って、次のベクトル$\boldsymbol{\tau}_1^{(2)}$が選択される。

$$\boldsymbol{\tau}_1^{(2)}=\begin{cases}\boldsymbol{a}_1^{(2)}、 & \lambda_1^{(2)}\geqq\rho_1^{(2)}\\ \boldsymbol{b}_1^{(2)} & \lambda_1^{(2)}<\rho_1^{(2)}\end{cases} \tag{45}$$

但し、$\lambda_1^{(2)}=\alpha_1^{(2)}/(1-\alpha_1^{(2)})$、$\rho_1^{(2)}=\beta_1^{(2)}/(1-\beta_1^{(2)})$である。$\boldsymbol{\tau}_1^{(2)}$を式(46)によりn次元ベクトルに変換し、それを第2特徴軸$\boldsymbol{\tau}_2$とする。

$$\boldsymbol{\tau}_2=P_1\boldsymbol{\tau}_1^{(2)} \tag{46}$$

一般に、第k($1\leqq k\leqq r$)番目の特徴軸は、$k-1$個の特徴軸$\boldsymbol{\tau}_i$($1\leqq i\leqq k-1$)に直交する空間S^{n-k+1}において$J(\boldsymbol{\tau})$を最大にするベクトルとして求められる。S^{n-k+1}は$n-k+1$個の正規直交基底$\boldsymbol{\nu}_i$($k\leqq i\leqq n$)によって生成される。

$$\boldsymbol{\nu}_i=c_i\left(I_n-\sum_{m=1}^{i-1}\boldsymbol{\nu}_m\boldsymbol{\nu}_m^T\right)\boldsymbol{\phi}_i \tag{47}$$

ここで、$\boldsymbol{\nu}_i=\boldsymbol{\tau}_i$($1\leqq i\leqq k-1$)である。$c_i$と$\boldsymbol{\phi}_i$はそれぞれ前述した正規化定数と任意ベクトルである。Ω_nからS^{n-k+1}への$n\times(n-k+1)$型行列P_{k-1}は

$$P_{k-1}=[\boldsymbol{\nu}_k\boldsymbol{\nu}_{k+1}\cdots\boldsymbol{\nu}_n] \tag{48}$$

で定義され、空間S^{n-k+1}でのB、W_1、W_2はそれぞれ

$$B^{(k)}=P_{k-1}^TBP_{k-1} \tag{49}$$

$$W_1^{(k)}=P_{k-1}^TW_1P_{k-1} \tag{50}$$

$$W_2^{(k)}=P_{k-1}^TW_2P_{k-1} \tag{51}$$

となる。次に、固有値問題

$$(B^{(k)}+W_2^{(k)})\boldsymbol{a}_i^{(k)}=\alpha_i^{(k)}\boldsymbol{a}_i^{(k)} \tag{52}$$

$$(B^{(k)}+W_1^{(k)})\boldsymbol{b}_i^{(k)}=\beta_i^{(k)}\boldsymbol{b}_i^{(k)} \tag{53}$$

を解いて得られる固有ベクトルの中から評価値の大きさに従って、次のベクトル$\boldsymbol{\tau}_1^{(k)}$を選択する。

$$\boldsymbol{\tau}_1^{(k)}=\begin{cases}\boldsymbol{a}_1^{(k)}、 & \lambda_1^{(k)}\geqq\rho_1^{(k)}\\ \boldsymbol{b}_1^{(k)} & \lambda_1^{(k)}<\rho_1^{(k)}\end{cases} \tag{54}$$

但し、$\lambda_1^{(k)}=\alpha_1^{(k)}/(1-\alpha_1^{(k)})$、$\rho_1^{(k)}=\beta_1^{(k)}/(1-\beta_1^{(k)})$で、$0<\alpha_i^{(k)}<1$、$0<\beta_i^{(k)}<1$である。$\boldsymbol{\tau}_1^{(k)}$を式(55)によりn次元ベクトルに変換し、それを第k特徴軸$\boldsymbol{\tau}_k$とする。

$$\boldsymbol{\tau}_k=P_{k-1}\boldsymbol{\tau}_1^{(k)} \tag{55}$$

次に、特徴軸$\boldsymbol{\tau}_k$の評価値$J(\boldsymbol{\tau}_k)$について論じる。$J(\boldsymbol{\tau}_k)$は

$$J(\boldsymbol{\tau}_k)=\max(J_1(\boldsymbol{\tau}_k),J_2(\boldsymbol{\tau}_k)) \tag{56}$$

で定義される。まず、$\lambda_1^{(k)}\geqq\rho_1^{(k)}$の場合を考える。このとき

$$J_1(\boldsymbol{\tau}_k)=\frac{\boldsymbol{\tau}_1^{(k)T}(B^{(k)}+W_2^{(k)})\boldsymbol{\tau}_1^{(k)}}{\boldsymbol{\tau}_1^{(k)T}W_1^{(k)}\boldsymbol{\tau}_1^{(k)}}=\frac{\boldsymbol{a}_1^{(k)T}(B^{(k)}+W_2^{(k)})\boldsymbol{a}_1^{(k)}}{\boldsymbol{a}_1^{(k)T}W_1^{(k)}\boldsymbol{a}_1^{(k)}}=\alpha_1^{(k)}/(1-\alpha_1^{(k)}) \tag{57}$$

であるから

$$J_1(\boldsymbol{\tau}_k)=\lambda_1^{(k)} \tag{58}$$

が得られる。一方、$J_2(\boldsymbol{\tau}_k)$は

$$J_2(\boldsymbol{\tau}_k)=\frac{\boldsymbol{a}_1^{(k)T}(B^{(k)}+W_1^{(k)})\boldsymbol{a}_1^{(k)}}{\boldsymbol{a}_1^{(k)T}W_2^{(k)}\boldsymbol{a}_1^{(k)}} \tag{59}$$

となる。ここで、

$$\boldsymbol{a}_1^{(k)T}(B^{(k)}+W_1^{(k)})\boldsymbol{a}_1^{(k)}\leqq\beta_1^{(k)} \tag{60}$$

$$\boldsymbol{a}_1^{(k)T}W_2^{(k)}\boldsymbol{a}_1^{(k)}\geqq 1-\beta_1^{(k)} \tag{61}$$

であるから

$$J_2(\boldsymbol{\tau}_k)\leqq\beta_1^{(k)}/(1-\beta_1^{(k)})=\rho_1^{(k)}\leqq\lambda_1^{(k)}=J_1(\boldsymbol{\tau}_k) \tag{62}$$

となる。従って、$\lambda_1^{(k)}\geqq\rho_1^{(k)}$の場合

$$J(\boldsymbol{\tau}_k)=\lambda_1^{(k)} \tag{63}$$

が得られる。同様にして、$\lambda_1^{(k)}<\rho_1^{(k)}$の場合

$$J(\boldsymbol{\tau}_k)=\rho_1^{(k)} \tag{64}$$

が得られる。以上の議論から、$J(\boldsymbol{\tau}_k)$は

$$J(\boldsymbol{\tau}_k)=\max(\lambda_1^{(k)}、\rho_1^{(k)}) \tag{65}$$

で与えられる。

特にW_1とW_2が可換である場合、上述の特徴抽出法は次のように簡単化される。行列W_1の固有ベクトル$\{\boldsymbol{a}_i\}$に対し、

$$J(\boldsymbol{a})=\max(J_1(\boldsymbol{a}),J_2(\boldsymbol{a})) \tag{66}$$

から、固有ベクトルを

$$J(\boldsymbol{a}_1)\geqq J(\boldsymbol{a}_2)\geqq\cdots\geqq J(\boldsymbol{a}_n) \tag{67}$$

と順序づける。このとき、$\boldsymbol{\tau}_k$は

$$\boldsymbol{\tau}_k=\boldsymbol{a}_k,\quad 1\leqq k\leqq r \tag{68}$$

で与えられる。

次に、本手法の有効性を数値例から示す。ここでは、MarillとGreen[10]の8次元2クラスのパターン分布で8次元パターン空間から3次元特徴空間への次元圧縮問題を考える。このデータは、アルファベット手書き文字から得られたもので、これまで多くの文献で用いられてきたものである[7]。

ここでは、2クラスの平均ベクトルが一致する場合の特徴抽出問題について、$W_1^{-1}W_2$の固有値問題を考察する。

$$W_1^{-1}W_2\boldsymbol{d}_i=\gamma_i\boldsymbol{d}_i\quad \gamma_1\geqq\cdots\geqq\gamma_8 \tag{69}$$

ここで、γ_i、$\boldsymbol{d}_i$はそれぞれ$W_1^{-1}W_2$の固有値、固有ベクトルである。固有値γ_iは次のように求められる。

Table 1　$W_1^{-1}W_2$の固有値

i	1	2	3	4
γ_i	12.06	8.41	2.73	1.77
i	5	6	7	8
γ_i	1.49	0.35	0.22	0.12

まず、F-E法について述べる。$W_1^{-1}W_2$と$W_2^{-1}W_1$の固有ベクトルは一致し、$W_2^{-1}W_1$の固有値が$W_1^{-1}W_2$の固有値の逆数であることから、$W_2^{-1}W_1$の固有値η_iは次のように与えられる。

Table 2 $W_2^{-1}W_1$の固有値

i	1	2	3	4
η_i	8.33	4.55	2.86	0.67
i	5	6	7	8
η_i	0.56	0.37	0.12	0.08

例えば、固有値η_1に対応する固有ベクトルは$\boldsymbol{d}_8$である。式(5)に従って、$\{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{d}_3\}$と$\{\boldsymbol{d}_8\boldsymbol{d}_7\boldsymbol{d}_6\}$とが比較され、評価値の総和の大きい$\{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{d}_3\}$が選択される。ここで、評価値の総和は23.2である。

一方、本手法では、W_1とW_2が可換であることから式(66)に従って$\{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{d}_8\}$が選択され、評価値の総和は28.8である。これは、本手法がF-E法より識別能力の高い特徴軸を選択していることを示している。

次に、他の特徴抽出法との比較を述べる。前述したように、空間Ω_nで$\boldsymbol{\mu}_1=\boldsymbol{\mu}_2$の場合、

$$I_n=W_1+W_2$$

が成立する。このとき、Malina法、Fukunaga-Koontz法[9]およびDivergenceに基づく特徴抽出法[7]は等価であることが報告されている[11]。Divergence法では$W_1^{-1}W_2$の固有ベクトルを

$$\gamma_{i1}+1/\gamma_{i1}\geqq\cdots\geqq\gamma_{i8}+1/\gamma_{i8}$$

に従って順序づけ、第k番目の特徴軸を固有値γ_{ik}に対応する固有ベクトルとする。上述のデータでは、

$$\gamma_{i1}+1/\gamma_{i1}=12.14$$
$$\gamma_{i2}+1/\gamma_{i2}=8.53$$
$$\gamma_{i3}+1/\gamma_{i3}=8.45$$

となり、それぞれ固有値γ_1、γ_2、γ_8が対応している。従って、Divergence法は$\{\boldsymbol{d}_1\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{d}_8\}$を選択する。これは、本手法から得られる特徴軸の組と一致する。

5．むすび

本論文では、拡張されたFisher比に基づく直交判別分析を提案した。本手法は、F-E法と比べ、逆行列計算を含まない固有値問題を解くことにより直交系を生成する。また、岡田一富田法と比べ、得られる座標系は直交性と無相関性を同時に満たす。更に、最適な直交系を与える手法について論じた。

Malinaの提案したFisher比と本手法で用いたFisher比との比較検討については、別の機会に報告する予定である。

文献

(1)S.S.Wilks:" Mathematical statiscs", John Wiley & Sons(1962).

(2)A.K.Jain:" Advances in statistical pattern recognition", in Pattern Recognition Theory and Applications, ed. P.A. Devijver, J. Kittler, pp.1-19, Springer-Verlag(1987).

(3)W.Malina:" On an extended Fisher criterion for feature selection", IEEE Trans. PAMI-3, No.5, pp.611-614 (1981).

(4)岡田敏彦、富田真吾：" 特徴抽出のための拡張フィシャー評価関数-Malina法とその問題点-"，信学論（Ａ），Ｊ６７-Ａ，3, pp.159-165(1984).

(5)J.Fehlauer and B.A.Eisenstein:" A declustering criterion for feature extraction in pattern recognition", IEEE Trans. Comput., C-27, No.3, pp.261-266(1978).

(6)D.H.Foley and J.W.Sammon Jr.:" An optimal set of discriminant vectors", IEEE Trans. Comput., C-24, No.3, pp.281-289(1975).

(7)K.Fukunaga:" Introduction to statistical pattern recognition", Academic Press(1972).

(8)G.Eden:" Comment on "A declustering criterion for feature extraction in pattern recognition"", IEEE Trans. PAMI-1, p.307(1979).

(9)K.Fukunaga and W.L.G.Koontz: " Application of the Karhunen-Loeve expansion to feature selection and ordering", IEEE Trans. Comput., C-19, No.4, pp.311-318(1970).

(10)T.Marill and D.M.Green:" On the effectiveness of receptors in recognition systems", IEEE Trans. IT-9, pp.11-27(1963).

(11)浜本義彦、金岡泰保、富田真吾： " パターン認識のための混合特徴抽出法"、信学論（Ａ），Ｊ７２-Ａ，10, pp.1659-1665(1989).

(12)R.O.Duda and P.E.Hart:" Pattern classification and scene analysis", John Wiley & Sons(1973).