

# 中心化部分カーネル主成分分析によるデノイジング Centered Subset Kernel PCA for de-noising

鷺沢 嘉一\*

田中 正行†

Yoshikazu WASHIZAWA  
washizawa@brain.riken.jp

Masayuki TANAKA  
mtanaka@ctrl.titech.ac.jp

## 1. あらまし

カーネル主成分分析の拡張である部分カーネル主成分分析に対して、中心化の概念を導入し、画像のデノイジングに応用する。部分カーネル主成分分析は、基底の部分集合を基底としてカーネル主成分分析を行うため、部分集合の大きさを調整することにより計算量を抑えることができる。このため、パッチを用いる画像処理手法に対して応用が期待できる。画像に対して主成分分析やカーネル主成分分析を適用する場合、通常平均ベクトルを引いてから処理を行うが、部分カーネル主成分分析の場合は基底を学習標本の部分集合とするため、平均ベクトルの定義が単純ではない。

本研究では、3種類の平均ベクトルの定義を考え、それぞれについて理論的に手法を導出する。さらにそのうちの、最も画像処理に適した手法について画像のデノイジングの実験を行い、その性能を示す。実験の結果、提案法は単純にデノイジングに適用するだけで、最先端のデノイジング手法の1つである FoE とほぼ同等の結果が得られることが分かった。

## 2. はじめに

カーネル主成分分析 (Kernel Principal component analysis, KPCA)[1] は、次元圧縮、パターン識別、画像処理[2]などに広く応用されている。しかし KPCA は、設計時に標本点数の大きさの固有値問題を解く必要があり、画像処理などへの応用では、計算量が実用的でない場合がある。

例えば、画像処理では、画像をブロックあるいはパッチと呼ばれる小領域に分割して処理を行うことが多い。512x512 ピクセルの画像を考えた場合、この画像から 5x5 ピクセルのパッチを取り出すと1枚の画像から  $n = (512 - 5 + 1)^2 \approx 2.5 \times 10^5$  個のパッチが得られる。4 バイトの浮動小数点のシステム上で KPCA を設計するためには、このサイズの対称行列の固有値分解が必要となるため行列の格納のために  $4 \times n(n + 1)/2 = 1.3 \times 10^2$  ギガバイトのメモリが必要となり、さらに固有値分解を解く必要がある。このサイズの大きさの密行列の固有値分解は現在のコンピュータでは現実的ではない。

このため、KPCA の処理量を削減する手法がいくつか提案されている。あらかじめクラスタリングなどにより標本数を削減する手法[3]、スパース KPCA を用いる手法[4, 5]、Nyström 近似を用いる手法[6]、部分カーネル主成分分析 (Subset KPCA, SubKPCA) を用いる手法[7]などが提案されている。スパース KPCA は、スパース

な KPCA の解を求めるものである。解がスパースになることにより、未知データに KPCA を適用するときの計算量は削減されるが、設計時の問題の大きさは同じであるため、大規模な問題に適用できない。Nyström 近似は、逆に設計時の計算量は抑えられるが、適用時の計算量が大きくなる問題がある。SubKPCA は、第一著者によって提案された手法で、KPCA を少ない基底で近似するものであり、基底をクラスタリングによって選択すれば、学習データに対する誤差は常に最小となる。すなわち、単純にクラスタリングにより標本数を削減する手法[3]よりも、常に学習データに対する誤差は小さくなる。

多くの書籍や論文では、PCA は分散共分散行列  $\Sigma$  の固有値分解として定義されている。標本  $x_1, \dots, x_N$  から分散共分散行列  $\Sigma$  を推定する場合は

$$\bar{x} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i \quad (1)$$

$$\hat{\Sigma} = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(x_i - \bar{x})^T \quad (2)$$

を用いることが多い。 $\hat{\Sigma}$  の固有ベクトル  $v_i$  を並べた行列  $V = [v_1, \dots, v_r]$  し、 $P = VV^T$  とする。 $\cdot^T$  はベクトルや行列の転置を表す。画像処理などに PCA を適用する場合、その入力データ  $x$  から  $\bar{x}$  を引き、PCA を適用し、 $\bar{x}$  を足す ( $P(x - \bar{x}) + \bar{x}$ ) という操作を行う。平均を引かずに、標本相関行列  $R = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N x_i x_i^T$  の固有値分解を行い、入力データ  $x$  に対して、 $Px$  を出力とすることもできるが、前者の方が性能が高いことが多い。本論文では前者の処理のことを中心化と呼ぶ。

KPCA の場合、標本平均  $\bar{x}$  を陽に求めることはできないが、アルゴリズムに組み込むことは可能である。画像処理に適用した場合も中心化 KPCA を用いた方が性能が高いことが多い。しかしながら SubKPCA を用いた場合、基底に標本の部分集合を用いるため、標本平均の取り方は一意ではない。そこで本論文では、SubKPCA における標本平均の取り方について論じ、画像のデノイジングに応用する。その結果、中心化 SubKPCA を用いることにより、最先端のデノイジング手法の1つである Field of experts[8] とほぼ同等の結果を得た。

## 3. KPCA と SubKPCA

$d$  次元の学習標本を  $x_1, \dots, x_n$  とする。5x5 のパッチを画像から作る場合、 $d = 25$  次元のベクトルが標本列として得られる。この標本列の主成分は、式(2) 標本分散共分散行列の固有ベクトルにより求められる。

KPCA は、この主成分分析にカーネルトリックを適用

\* (独) 理化学研究所 脳科学総合研究センター

† 東京工業大学理工学研究所

した手法である。カーネルトリックは、学習標本を特徴空間と呼ばれる高次元空間  $\mathcal{F}$  へ非線形写像してから処理を行う。この写像を  $\Phi$  とおく。

$$\Phi: \mathbf{x} \mapsto \Phi(\mathbf{x}), \mathbb{R}^d \rightarrow \mathcal{F} \quad (3)$$

このとき、 $\Phi$  自身を定義せず、下記の間係を満たすカーネル関数  $k(\cdot, \cdot)$  から導かれる写像  $\Phi$  を用いて計算を行うことにより、現実的な計算量で演算を行う。

$$k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \langle \Phi(\mathbf{x}_1) | \Phi(\mathbf{x}_2) \rangle, \forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in \mathbb{R}^d \quad (4)$$

ここで、 $\langle \cdot | \cdot \rangle$  は内積を表す。Mercer カーネルと呼ばれる  $k(\cdot, \cdot)$  は、上式を満たす  $\Phi$  が存在する。

特徴空間での平均ベクトルを零として、KPCA を考える。相関作用素は、 $R = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\Phi(\mathbf{x}_i)\rangle\langle\Phi(\mathbf{x}_i)|$  で与えられる。ここで、ケット-ブラ記号  $|a\rangle\langle b|$ , ( $a, b \in \mathcal{F}$ ) は任意の  $c \in \mathcal{F}$  について  $|a\rangle\langle b|c = \langle c|b\rangle a$  を満たす作用素である。 $\mathcal{F}$  が有限次元の場合、 $|a\rangle\langle b|$  は  $ab^T$  ( $ab^H$ ) と等価であるが、カーネル関数の選び方によっては  $\mathcal{F}$  が無限次元となるため、ケット-ブラ記号で統一する。また、 $\mathbb{R}^n \rightarrow \mathcal{F}$  の作用素  $S = [\Phi(\mathbf{x}_1) \dots \Phi(\mathbf{x}_n)]$  とおくと  $R = \frac{1}{n} S S^*$  と表せる。ここで  $*$  は共役作用素を表す。 $*$  は実有限次元では転置、複素有限次元では共役転置と等価である。

$R$  は  $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$  の作用素であるため固有値分解が難しい、そこでカーネルグラム行列  $K_x = \frac{1}{n} S^* S \in \mathbb{R}^{n \times n}$  の固有値分解を考える。ここで  $K_x$  の  $i, j$  要素は  $(K_x)_{i,j} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  で与えられる。 $K_x$  の固有値分解  $K_x = \sum_{i=1}^n \lambda_i v_i v_i^T$  とすると、 $R$  の固有値は  $\lambda_i$  と一致し、 $i$  番目の固有ベクトル  $u_i$  は  $u_i = \frac{1}{\lambda_i} S v_i$  で与えられる。

行列表記を用いると、

$$V = [v_1 v_2 \dots v_n] \quad (5)$$

$$\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \quad (6)$$

と置けば、 $K_x = V \Lambda V^T$  となり、 $R$  の固有値分解は

$$R = U \Lambda U^T \quad (7)$$

$$U = [u_1 u_2 \dots u_n] \quad (8)$$

$$U = S V \Lambda^{-1/2} \quad (9)$$

となる。

固有値は降順に並んでいるとし、入力  $\mathbf{x}$  の  $r$  次元部分空間 ( $r \leq n$ ) への変換と射影を考える。

$$V_r = [v_1 v_2 \dots v_r] \quad (10)$$

$$\Lambda_r = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r) \quad (11)$$

$$U_r = [u_1 u_2 \dots u_r] = S V_r \Lambda_r^{-1/2} \quad (12)$$

とおくと、 $r$  次元部分空間への変換と射影は

$$U_r^T \Phi(\mathbf{x}) = \Lambda_r^{-1/2} V_r^T S^* \Phi(\mathbf{x}) \quad (13)$$

$$P_{\text{KPCA}} \Phi(\mathbf{x}) = U_r U_r^T \Phi(\mathbf{x}) = S V_r \Lambda_r^{-1} V_r^T S^* \Phi(\mathbf{x}) \quad (14)$$

で与えられる。ここで  $S^* \Phi(\mathbf{x}) = [k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}), \dots, k(\mathbf{x}_n, \mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^n$  である。

以上の議論より、KPCA の変換を求めるには  $n \times n$  行列の  $K_x$  を求め、それを固有値分解する必要がある。入力  $\mathbf{x}$  に対する変換を求めるときには、 $n$  回のカーネル関数の演算と  $r \times n$  行列  $\Lambda_r^{-1/2} V_r^T$  と  $n$  次元ベクトルの積の演算が必要となる。

主成分分析は、分散最大基準や平均二乗誤差最小化基準から導出される [9]。KPCA の場合は特徴空間  $\mathcal{F}$  への写像後の平均二乗誤差基準で特徴付けされる [7]。

$$\min_X \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\Phi(\mathbf{x}_i) - X \Phi(\mathbf{x}_i)\|^2 \quad (15)$$

subject to  $\text{rank}(X) \leq r, \mathcal{N}(X) \supset \mathcal{R}(S)^\perp$ ,

ここで、 $\mathcal{R}$  と  $\mathcal{N}$  はそれぞれ値域 (像) と核空間 (核) を表す。式 (14) にあるように  $X = U_r U_r^T$  となるとき、最適化問題 (15) は最小化される。 $X$  は  $\mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}$  の作用素であり、問題は  $\mathcal{F}$  の大きさの問題であるが、 $\Phi(\mathbf{x}_i)$ ,  $i = 1, \dots, n$  によって張られる空間は高々  $n$  次元であるため、問題は、大きさ  $n$  の双対問題に変換され、解くことができる。すなわち、KPCA は、基底  $\Phi(\mathbf{x}_1), \dots, \Phi(\mathbf{x}_n)$  が張る空間の中で (15) で定義される評価基準を最小化する  $X$  を求めていることになる。このため、固有値問題の大きさが  $n \times n$  となる。

SubKPCA では、基底のための標本集合をもとの標本とは別に考える。基底のための標本を  $\Phi(\mathbf{y}_1), \dots, \Phi(\mathbf{y}_m)$  とし、 $T = [\Phi(\mathbf{y}_1) \dots \Phi(\mathbf{y}_m)]$  とおく。この標本が張る空間、すなわち  $\mathcal{R}(T)$  の中で同じ評価関数を考える。

$$\min_X \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \|\Phi(\mathbf{x}_i) - X \Phi(\mathbf{x}_i)\|^2 \quad (16)$$

subject to  $\text{rank}(X) \leq r,$   
 $\mathcal{N}(X) \supset \mathcal{R}(T)^\perp, \mathcal{R}(X) \supset \mathcal{R}(T).$

解の存在する空間を  $m$  個の基底が張る  $m$  次元部分空間に限ることにより、問題の大きさは  $m$  となる。行列  $K_y = T^* T \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ,  $K_{xy} = S^* T \in \mathbb{R}^{n \times m}$  とおく ( $(K_y)_{ij} = k(\mathbf{y}_i, \mathbf{y}_j)$ ,  $(K_{xy})_{ij} = k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_j)$ )。  $z_i$  を一般固有値分解

$$K_{xy}^T K_{xy} z = \lambda K_y z \quad (17)$$

の  $i$  番目の固有値に対応する固有ベクトルとする。  $z_i$  のノルムは  $\langle z_i | K_y z_i \rangle = 1$  となるように正規化されているとする。  $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m$  が  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  の部分集合で与えられているとき、  $Z_r = [z_1 \dots z_r]$  とおくと最適化問題 (16) の解は  $P_{\text{SubKPCA}} = T Z Z^T T^*$  で与えられる。

一般固有値分解  $K_{xy}^T K_{xy} z = \lambda K_y z$  は、  $K_{xy}^T K_{xy} \in \mathbb{R}^{m \times m}$  であるため、問題の大きさは  $m$  である。また、入力  $\mathbf{x}$  の変換を求めるときも  $m$  回のカーネル関数の演算と  $r \times m$  行列と  $m$  次元ベクトルの積で求められる。基底のための部分集合  $\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_m$  が  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  と一致するとき ( $m = n$ )、SubKPCA は KPCA と一致し、  $m$  を小さくすると学習標本  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$  に対する誤差は大きくなる。すなわち  $m$  は精度と計算量のトレードオフを調整するパラメータとなる。

#### 4. 中心化 SubKPCA

KPCA の中心化を考える場合、特徴空間に写像された標本  $\Phi(x_1), \dots, \Phi(x_n)$  からその平均

$$\bar{\Phi} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \Phi(x_i) = \frac{1}{n} S \mathbf{1}_n \quad (18)$$

を引いてから処理を行う。ここで  $\mathbf{1}_n$  は全要素が1の  $n$  次元ベクトルを表す。平均を引いた標本を  $\bar{\Phi}(x_i) = \Phi(x_i) - \bar{\Phi}$  とおき、

$$\bar{S} = [\bar{\Phi}(x_1) \dots \bar{\Phi}(x_n)] = S - \bar{\Phi} \mathbf{1}_n^T \quad (19)$$

とおく。中心化 KPCA は KPCA の  $S$  の代わりに  $\bar{S}$  を用いればよい。すなわち、 $\bar{K}_x = \bar{S}^* \bar{S} = K_x - \frac{1}{n} K_x \mathbf{1}_{nm} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{nm} K_x + \frac{1}{n^2} \mathbf{1}_{nm} K_x \mathbf{1}_{nm}$  を固有値分解すればよい。ここで  $\mathbf{1}_{nm}$  は全要素が1の  $n \times n$  行列を表す。これにより、 $\bar{\Phi}$  を陽に求めることなく、中心化を KPCA に組み込みことができる。

SubKPCA は基底に全標本の部分集合を用いるため、その標本平均の定義は単純でない。そこで3つの標本平均を考える。

[i] 全標本の平均 (式 (18))

[ii] 基底のための標本の部分集合  $y_1, \dots, y_m$  の平均

[iii] 基底のための標本の部分集合  $y_1, \dots, y_m$  が張る空間  $\mathcal{R}(T)$  の中で、全標本の平均 (式 (18)) を最良に近似するもの

[i] 全標本の平均を用いる場合 KPCA の場合と同様に  $S$  の代わりに  $\bar{S}$  を用いばよい。一般固有値問題 (17) は、 $\bar{K}_{xy} = \bar{S}^* T = K_{xy} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{nm} K_{xy}$  と  $\bar{K}_{xy}^T \bar{K}_{xy} = K_{xy} - \frac{1}{n} K_{xy} \mathbf{1}_{nm} K_{xy}$  を用いて

$$\bar{K}_{xy}^T \bar{K}_{xy} z = \lambda K_y z \quad (20)$$

となる。

[ii] 基底のための標本の部分集合  $y_1, \dots, y_m$  の平均 平均ベクトルは

$$\bar{\Phi}_y = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \Phi(y_i) = \frac{1}{m} T \mathbf{1}_m \quad (21)$$

で与えられ、平均を引いた標本は

$$\bar{S}_y = S - \bar{\Phi}_y \mathbf{1}_n^T = S - \frac{1}{m} T \mathbf{1}_{nm} \quad (22)$$

となる。SubKPCA の一般固有値問題は、

$$\bar{K}_{xy} = \bar{S}_y^* T = K_{xy} - \frac{1}{M} \mathbf{1}_{nm} K_y \quad (23)$$

を用いて

$$\bar{K}_{xy}^T \bar{K}_{xy} z = \lambda K_y z \quad (24)$$

となる。

[iii] 基底のための標本の部分集合  $y_1, \dots, y_m$  が張る空間  $\mathcal{R}(T)$  の中で、全標本の平均 (式 (18)) を最良に近似するもの  $\mathcal{R}(T)$  のベクトルは基底の線形和

$$\sum_{i=1}^m \alpha_i \Phi(y_i) = T \alpha \quad (25)$$

で与えられる。ここで  $\alpha = [\alpha_1, \dots, \alpha_m]$  は係数ベクトルである。全標本の平均  $\bar{\Phi}$  の最良近似は

$$\min_{x \in \mathcal{R}(T)} \|x - \bar{\Phi}\| = \min_{\alpha} \|T \alpha - \bar{\Phi}\| \quad (26)$$

で求められる。最小解は

$$\alpha = \frac{1}{n} K_y^{-1} K_{xy}^T \mathbf{1}_n \quad (27)$$

で与えられ、SubKPCA の一般固有値問題は

$$\bar{S}' = S - \frac{1}{n} T K_y^{-1} K_{xy}^T \mathbf{1}_{nm} \quad (28)$$

$$K'_{xy} = \bar{S}'^* T = K_{xy} - \frac{1}{n} \mathbf{1}_{nm} K_{xy} \quad (29)$$

を用いて

$$K_{xy}'^T K'_{xy} z = \lambda K_y z \quad (30)$$

となる。ここで、 $I_n$  は  $n$  次元単位行列を表す。

この場合は、「1. 全標本の平均を用いる場合」と等価になる。SubKPCA は問題を標本の部分集合が張る空間に限っているため、全標本の平均を用いる場合と、標本の部分集合が張る空間の中で全標本の平均を最良近似する場合は等価となる。しかしながら、次節で述べる原像 (pre-image) を求める段階においては、両者は等価にはならない。

#### 5. 原像 (pre-image)

KPCA によって変換されたベクトルは特徴空間  $\mathcal{F}$  の元となる。画像復元に応用するためにはこれを入力空間  $\mathbb{R}^d$  へ引き戻す必要がある。このためには入力  $x$  に対して、評価関数

$$\rho(w) = \|P_{\text{KPCA}} \Phi(x) - \Phi(w)\|^2 \quad (31)$$

を最小にするベクトル  $w$  が用いられる [10]。また、中心化を行った場合には、

$$\rho'(w) = \|P_{\text{KPCA}}(\Phi(x) - \bar{\Phi}) - (\Phi(w) - \bar{\Phi})\|^2 \quad (32)$$

が用いられる [2]。この評価関数の最小化は、不動点法に基づく反復アルゴリズムが用いられ、Gaussian カーネル関数  $k(x_1, x_2) = \exp(-c\|x_1 - x_2\|^2)$  を用いた場合、その更新式は、

$$w_{t+1} = \frac{\sum_{i=1}^n \gamma_i \exp(-c\|w_t - x_i\|^2) x_i}{\sum_{j=1}^n \gamma_j \exp(-c\|w_t - x_j\|^2)} \quad (33)$$

の形で与えられる [10]. ここで,  $\gamma_i$  は,  $\rho(\mathbf{w})$  を展開したときの係数

$$\rho(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^n \gamma_i k(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) + C \quad (34)$$

である.  $C$  は  $\mathbf{w}$  を含まない項を表す.

通常の KPCA を用いる場合や SubKPCA を用いる場合の [i]  $\Phi$  が全標本の平均で与えられた場合, 式 (33) で定義される 1 回の更新につき  $n$  回のカーネル関数の演算と足し込みが必要となる. 前述の通り, パッチを用いる画像処理に応用した場合,  $n$  は 25 万程度となり非常に計算量が大きい. そこで, 前節で述べた [ii], [iii] から導出される部分集合を基底とした更新式を用いる.

$$\mathbf{w}_{t+1} = \frac{\sum_{i=1}^m \gamma_i \exp(-c\|\mathbf{w}_t - \mathbf{y}_i\|^2) \mathbf{y}_i}{\sum_{j=1}^m \gamma_j \exp(-c\|\mathbf{w}_t - \mathbf{y}_j\|^2)} \quad (35)$$

[ii] の場合についての原像更新式 式 (24) から求まる固有ベクトルから定義される  $P_{\text{SubKPCA}} = TZZ^T T^*$  と平均ベクトル式 (21) を用いて式 (32) を展開すると

$$\rho(\mathbf{w}) = \langle -2ZZ^T \mathbf{h}_x + \frac{2}{m} ZZ^T K_y \mathbf{1}_m - \frac{2}{m} \mathbf{1}_m \mathbf{h}_w \rangle + C \quad (36)$$

となる. ここで  $C$  は  $\mathbf{w}$  を含まない項,  $\mathbf{h}_x = T^* \Phi(\mathbf{x}) = [k(\mathbf{y}_1, \mathbf{x}), \dots, k(\mathbf{y}_m, \mathbf{x})]^T \in \mathbb{R}^m$ ,  $\mathbf{h}_w = T^* \Phi(\mathbf{w}) = [k(\mathbf{y}_1, \mathbf{w}), \dots, k(\mathbf{y}_m, \mathbf{w})]^T$  を表す.  $\gamma_1 = -2ZZ^T \mathbf{h}_x + \frac{2}{m} ZZ^T K_y \mathbf{1}_m - \frac{2}{m} \mathbf{1}_m$  とおくと,

$$\rho(\mathbf{w}) = \sum_{i=1}^m (\gamma_1)_i k(\mathbf{y}_i, \mathbf{w}) + C \quad (37)$$

となり, 式 (35) の  $\gamma_i$  に  $(\gamma_1)_i$  を用いることで更新式が得られる.

[iii] の場合についての原像更新式 式 (30) から求まる固有ベクトルから定義される  $P_{\text{SubKPCA}} = TZZ^T T^*$  と平均ベクトル式 (25), (27) を用いて式 (32) を展開すると

$$\rho(\mathbf{w}) = \langle -2ZZ^T \mathbf{h}_x + \frac{2}{n} ZZ^T K_y^{-1} K_{xy}^T \mathbf{1}_n - \frac{2}{n} K_y^{-1} K_{xy}^T \mathbf{1}_n \mathbf{h}_w \rangle + C \quad (38)$$

となり,  $\gamma_2 = -2ZZ^T \mathbf{h}_x + \frac{2}{n} ZZ^T K_y^{-1} K_{xy}^T \mathbf{1}_n - \frac{2}{n} K_y^{-1} K_{xy}^T \mathbf{1}_n$  とおくと, 式 (35) の  $\gamma_i$  に  $(\gamma_2)_i$  を用いることで更新式が得られる.

## 6. 実験

### 6.1 Gauss 雑音

512x512 ピクセルの標準画像 "Lenna" と "Barbara" を用いて実験を行った. 初期の画素の値は 0-255 とする. 実験の手順は以下の通りである.

1. 分散  $\sigma$  の Gauss 雑音を足す.
2. 画素の値を [0, 1] に正規化し, 5x5 のパッチを得る.

3. K-means を用いて  $m$  個の基底のための部分集合を得る.

4. 全パッチを学習サンプル, K-means で得られた部分集合を基底として中心化 SubKPCA の射影作用素を求め, 各パッチに適用する.

5. 各パッチの原像を求める.

6. パッチの原像から画像を再構成する.

中心化 SubKPCA における平均ベクトルには, [iii] の手法を用いた. 実験に用いたパラメータは以下の通りである.

1. パッチの大きさ: 5x5
2. 基底の数  $m = 3000$
3. 主成分の数 (射影作用素の階数), 10
4. ガウシアンカーネル関数  $k(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \exp(-c\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2\|^2)$ ,  $c = 200$ .

原画像の大きさは 512x512 であり, 得られるパッチの数は  $n = 25$  万程度である. KPCA を適用するには  $K_x$  の格納のために 4 バイト浮動小数点では,  $n(n+1)/2 \times 4 \approx 130$  ギガバイトのメモリが必要となり現実的に計算ができない. しかし, SubKPCA の  $K_{xy}^T K_{xy}$  は,  $m \times n$  と  $n \times m$  の行列積であり,  $n$  を分割することにより現実的な計算時間で計算ができる. 2.66GHz の Intel Core 2 Quad CPU 上での主な計算時間は,

1. K-means:  $1.0 \times 10^4$  秒
2.  $K_y$ :  $1.2 \times 10^0$  秒
3.  $K_{xy}^T \mathbf{1}_n$ :  $1.7 \times 10^2$  秒
4.  $K_{xy}^T K_{xy}$ :  $3.7 \times 10^2$  秒
5. 一般固有値分解:  $1.6 \times 10^1$  秒
6. 原像:  $2.9 \times 10^2$  秒

である.  $n = 25$  万であるため, K-means が  $10^4$  秒と最も計算時間が大きい. しかし, K-means については, 標本点を削減したり, 繰り返しを途中で打ち切ることにより高速化ができると考えられる.

実験結果を表 1, 2 に示す. 中心化 SubKPCA は, Barbara において, Fields of Experts (FoE) [8] とほぼ同等の結果となった. また, 中心化をすることにより, デノイジングの性能が向上することが確認できた.

図 1, 2 に復元画像を示す. 中心化 SubKPCA は FoE に比べ, 画像中の縞模様の復元は高精度にできているが, 平坦な部分では雑音が残っていることが分かる. Lenna は, Barbara よりも平坦な部分が多いため, FoE に比べ, 中心化 SubKPCA の性能が低いと考えられる.

表1: デノイズングの結果 (PSNR) Lenna

$\sigma$	10	15	20	25
中心化 SubKPCA	32.84	32.00	30.57	30.06
SubKPCA	29.96	28.89	29.76	28.65
FoE [8]	35.04	33.27	31.92	30.82
BM3D [11]	35.93	34.27	33.05	32.08

表2: デノイズングの結果 (PSNR) Barbara

$\sigma$	10	15	20	25
中心化 SubKPCA	31.31	30.53	28.52	27.86
SubKPCA	24.67	25.30	26.56	26.29
FoE [8]	32.83	30.22	28.32	27.04
BM3D [11]	34.98	33.11	31.78	30.72

## 6.2 Salt-and-pepper 雑音

次に前節の Gauss 雑音に代えて, Salt-and-pepper 雑音を付加したときの実験結果を示す. ここで, Salt-and-pepper 雑音は, パラメータ  $p$  によって特徴付けられ, 各画素が, 確率  $p/2$  で元の画素が白 (255) に変換され, 確率  $p/2$  で黒 (0) に変換されるような雑音とする.

デノイズングの結果を表3に示す. 比較として,  $3 \times 3$  のメジアンフィルタと通常の主成分分析を示す. 中心化 SubKPCA と PCA のパラメータは PSNR が最大となるように決められている.

前項で示した FoE や BM3D は雑音に分散が既知の Gauss 雑音を仮定しているため, Salt-and-pepper 雑音には対応していない.

## 7. まとめ

本研究では, 中心化 SubKPCA を画像のデノイズングに適用し, その性能を調べた. SubKPCA に中心化を適用する場合, 平均ベクトルの定義は単純ではなく, 本研究では3種類の平均の求め方を提案し, 原像の反復アルゴリズムまで導出した.

実験では, デノイズングの応用に関して最も適切であると考えられる [iii] の平均ベクトルを求める手法を用いて画像の復元を行い, 他の手法との比較を行った. 比較の結果, 中心化 SubKPCA は最先端のデノイズングの1つである FoE とほぼ同等の性能を示すことが確認できた. BM3D は, デノイズングを主目的としたアプリケーションよりの手法であり, FoE と中心化 SubKPCA は理論的に直接導かれる手法である. また, FoE や他のカーネルトリックを用いた復元法 [10, 2] では, ノイズフリーの学習データが必要であるのに対し, 本研究のアプローチは雑音の混入した画像自身から特徴を取り出し, 雑音成分を抑えるという相違点がある.

本手法は実験結果で述べた通り, 周波数帯によって復元性能が大きく変わる. このため, ウェーブレットのようなサブバンド手法と組み合わせるとにより, 更なる性能の向上が期待できるが, これについては今後の課題とする.

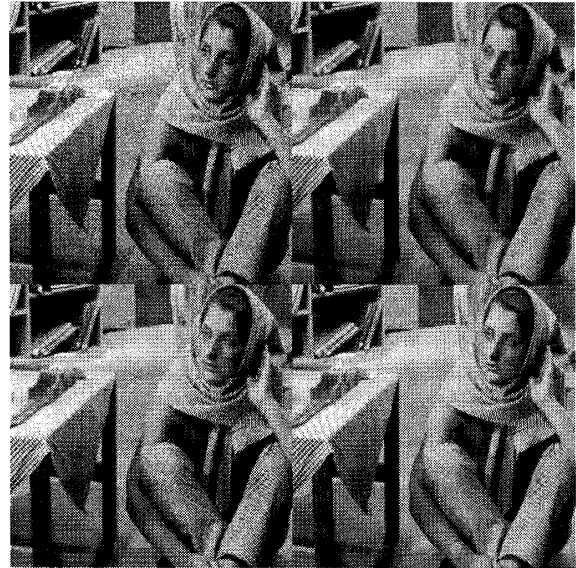


図1: デノイズング結果: Barbara  $\sigma = 20$ , 左上: 雑音の混入した画像, 右上: 中心化 SubKPCA, 左下: FoE ([http://www.gris.informatik.tu-darmstadt.de/~sroth/research/foe/denoising\\_results.html](http://www.gris.informatik.tu-darmstadt.de/~sroth/research/foe/denoising_results.html)), 右下: BM3D (<http://www.cs.tut.fi/~foi/GCF-BM3D/>)

表3: デノイズングの結果 (PSNR) Salt-and-pepper 雑音, Barbara

p	0.01	0.02	0.04	0.10
中心化 SubKPCA	28.34	26.71	24.70	22.71
Median	25.41	25.36	25.24	24.84
PCA	29.10	26.87	24.93	22.76

## 参考文献

- [1] B. Schölkopf, A. Smola and K.-R. Müller: "Nonlinear component analysis as a kernel eigenvalue problem", *Neural Computation*, **10**, 5, pp. 1299–1319 (1998).
- [2] K. I. Kim, M. O. Franz and B. Schölkopf: "Iterative kernel principal component analysis for image modeling", *IEEE Trans. Pattern Analysis and Machine Intelligence*, **27**, 9, pp. 1351–1366 (2005).
- [3] 市野, 坂野, 小松: "クラスタリングを用いた核非線形相互部分空間法の処理量削減手法", *電子情報通信学会論文誌*, **J90-D**, 8, pp. 2168–2181 (2007).
- [4] M. E. Tipping: "Sparse kernel principal component analysis", *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, **13**, pp. 633–639 (2001).
- [5] A. J. Smola, O. L. Mngasarian and B. Schölkopf: "Sparse kernel feature analysis", *Technical report 99-04*, University of Wisconsin (1999).

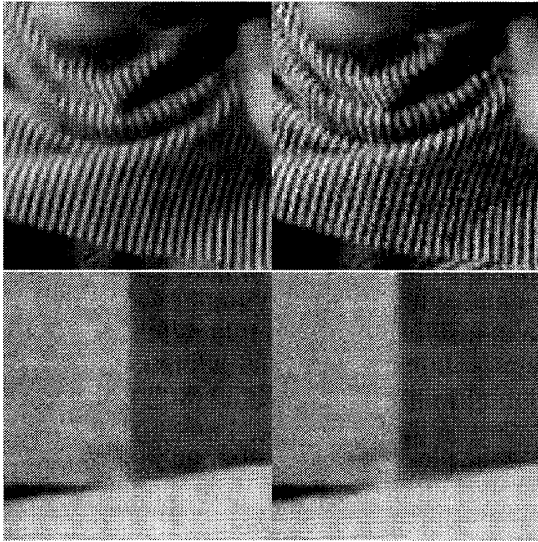


図 2: Barbara の復元画像の拡大,  $\sigma = 20$ , 左: 中心化 SubKPCA, 右: FoE

- [6] C. K. I. Williams and M. Seeger: “Using the nystrom method to speed up kernel machines”, *Advances in Neural Information Processing Systems (NIPS)*, **13**, pp. 682–688 (2001).
- [7] Y. Washizawa: “Subset kernel principal component analysis”, *Proceedings of 2009 IEEE International workshop on machine learning for signal processing*, IEEE, p. 40 (2009).
- [8] S. Roth and M. J. Black: “Fields of experts”, *International Journal of Computer Vision*, **82**, 2, pp. 205–229 (2009).
- [9] E. Oja: “Subspace methods of pattern recognition”, Wiley, New-York (1983).
- [10] S. Mika, B. Schölkopf, A. J. Smola, K.-R. Müller, M. Scholz and G. Rätsch: “Kernel PCA and denoising in feature spaces”, *Advances in Neural Information Processing Systems 11* (Eds. by M. S. Kearns, S. A. Solla and D. A. Cohn), MIT Press (1999).
- [11] K. Dabov, A. Foi, V. Katkovnik and K. Egiazarian: “Image denoising by sparse 3D transform-domain collaborative filtering”, **16**, 8, pp. 2080–2095 (2007).