

独立成分分析

京都大学大学院工学研究科化学工学専攻
プロセスシステム工学研究室
加納 学

2002年5月第1版作成

Copyright ©2002 by Manabu Kano. All rights reserved.

[注意事項]

自由に利用していただいて結構ですが、著作権は一切放棄していません。また、本資料の間違いなどによって生じた不利益などに対して、著者は一切責任を負いません。勿論、間違いの指摘やアドバイスは歓迎します。

目次

1	必要な基礎知識	3
1.1	確率過程の定常性	3
1.2	独立と無相関	4
1.3	キュムラント (累積数)	5
1.4	独立性の基準	6
2	独立成分分析	6
2.1	問題設定	7
2.2	前処理としての無相関化 (sphering)	7
2.3	4次キュムラントと独立性	8
2.4	独立成分の計算	10
3	プログラムと計算例	12
3.1	プログラム	12
3.2	計算例	14
4	おわりに	15

1 必要な基礎知識

本レポートでは、4次のキュムラントに基づく独立成分分析 (Independent Component Analysis; ICA) について解説する。まず本節では、独立成分分析を理解するために最低限必要な基礎知識についてまとめておく。

1.1 確率過程の定常性

不規則に変動する観測データは

$$\{x(\omega, t); t = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \omega \in \Omega\} \quad (1)$$

と表すことができる。ここで、 ω は観測データの不規則性を表すパラメータである。すなわち、ある時刻 $t = t_0$ における変数 $x(\omega, t_0)$ は、標本空間 (sample space) Ω に含まれる標本点 (sample point) ω に実数値を対応させたものであり、確率変数 (random variable; stochastic variable) である。Eq. (1) で与えられる確率変数の系列は確率過程 (stochastic process) あるいは時系列 (time series) と呼ばれる。また、パラメータ ω を固定すれば、変数 $x(t)$ は見本過程 (sample process) と呼ばれる時間関数となる。なお、以下では確率過程を簡単に $x(t)$ と表す。

確率過程 $x(t)$ について、任意の個数 n の任意の時刻 t_1, t_2, \dots, t_n を固定して得られる確率変数 $x(t_1), x(t_2), \dots, x(t_n)$ の同時確率分布 (simultaneous probability distribution) は

$$P\{x(t_1) \leq a_1, \dots, x(t_n) \leq a_n\} = \int_{-\text{inf}}^{a_1} \dots \int_{-\text{inf}}^{a_n} p(x(t_1), \dots, x(t_n)) dx(t_1) \dots dx(t_n) \quad (2)$$

で与えられる。ここで、 $p(x(t_1), \dots, x(t_n))$ は同時確率密度関数 (simultaneous probability density function) である。いま、任意の τ について、

$$p(x(t_1), \dots, x(t_n)) = p(x(t_1 + \tau), \dots, x(t_n + \tau)) \quad (3)$$

が成立するとき、すなわち確率分布が時不変であるとき、確率過程 $x(t)$ は強定常 (strongly stationary) であるという。

確率過程 $x(t)$ の k 次モーメント (k -th order moment) M_k は

$$\begin{aligned} M_k(t_1, \dots, t_k) &= E[x(t_1) \dots x(t_k)] \\ &= \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} \dots \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x(t_1) \dots x(t_k) p(x(t_1), \dots, x(t_k)) dx(t_1) \dots dx(t_k) \end{aligned} \quad (4)$$

で定義される。ここで、 $E[\cdot]$ は期待値 (expectation) を表す。特に、1次および2次モーメントを平均値 (mean) および自己相関関数 (auto-correlation function) と呼び、それぞれ

$$m_x(t) = E[x(t)] = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x(t) p(x(t)) dx(t) \quad (5)$$

および

$$R_x(t, t + \tau) = E[x(t)x(t + \tau)] = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x(t)x(t + \tau) p(x(t), x(t + \tau)) dx(t) dx(t + \tau) \quad (6)$$

で表す。また、2次中心モーメント (second order central moment)

$$C_x(t, t + \tau) = E[\{x(t) - m_x(t)\}\{x(t + \tau) - m_x(t + \tau)\}] \quad (7)$$

を共分散関数 (covariance function) と呼び、特に

$$\sigma_x^2(t) = C_x(t, t) = E [\{x(t) - m_x(t)\}^2] \quad (8)$$

を分散 (variance) という .

2 次モーメントが有界すなわち $M_2(t) = E[x^2(t)] < \infty$ で、2 次モーメントまで定常、すなわち平均値 $m_x(t)$ が t に依らず一定であり、かつ自己相関関数 $R_x(t, t + \tau)$ が時間差 τ のみの関数となるとき、確率過程 $x(t)$ は弱定常 (weakly stationary) であるという . したがって、 $M_2(t) < \infty$ であれば、強定常性は弱定常性を意味する¹ .

Eq.s. (5), (6) は平均値と自己相関関数の集合平均の意味における定義である . しかし現実には、1 本の見本過程から確率過程の統計的性質を調べることが多い . 確率過程 $x(t)$ の見本過程 $x_s(t)$ について、時間平均の意味での平均値 m_{x_s} と自己相関関数 $R_{x_s}(\tau)$ は

$$m_{x_s} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N+1} \sum_{t=-N}^N x_s(t) \quad (9)$$

$$R_{x_s}(\tau) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2N+1} \sum_{t=-N}^N x_s(t)x_s(t+\tau) \quad (10)$$

で与えられる . この確率過程 $x(t)$ について、

$$m_x(t) = m_{x_s} \quad (11)$$

$$R_x(t, t + \tau) = R_{x_s}(\tau) \quad (12)$$

が成り立つならば、確率過程 $x(t)$ はエルゴード的 (ergodic) であるという . したがって、このエルゴード性の仮定が成立するならば、無限に長い 1 本の見本過程を解析することによって、その確率過程の 1 次および 2 次の性質を決定することができる .

1.2 独立と無相関

n 個の確率変数 x_1, x_2, \dots, x_n の同時確率分布が

$$P\{x_1 \leq a_1, \dots, x_n \leq a_n\} = \prod_{i=1}^n P\{x_i \leq a_i\} \quad (13)$$

と分解されるとき、確率変数 x_1, x_2, \dots, x_n は互いに独立 (independent) であるという . Eq. (13) は確率密度関数を用いて

$$p(x_1, \dots, x_n) = \prod_{i=1}^n p(x_i) \quad (14)$$

と書くこともできる . 確率変数 x_1, x_2, \dots, x_n が互いに独立であれば、以下の関係式が成り立つ .

$$R_{x_i x_j} = E[x_i x_j] = E[x_i] E[x_j] \quad , \quad (i \neq j) \quad (15)$$

$$C_{x_i x_j} = E[(x_i - m_{x_i})(x_j - m_{x_j})] = 0 \quad , \quad (i \neq j) \quad (16)$$

ここで、 $R_{x_i x_j}$ および $C_{x_i x_j}$ はそれぞれ相互相関 (cross-correlation) および共分散 (covariance) と呼ばれる .

¹ 強定常過程であれば弱定常過程でもあると安易に述べているテキストもあるが、そうではない . すなわち、強定常過程は 2 次モーメントが有界であることを前提としていない . 注意が必要である .

いま，2つの確率変数 x_i, x_j について

$$C_{x_i x_j} = 0 \quad (17)$$

が成り立つならば，確率変数 x_i, x_j は無相関 (uncorrelated) であるという．この定義から，確率変数 x_i, x_j が独立であれば確率変数 x_i, x_j は常に無相関であることがわかる．しかし，Eq. (17) が成立しても，一般に Eq. (14) が成立するとは限らない．すなわち，無相関であっても独立とは限らない．ただし，同時確率分布が多次元正規分布であるならば，独立と無相関は同等となる．

独立と無相関に関する上記の内容を確率過程にあてはめると以下ようになる．2つの確率過程 $x_i(t), x_j(t)$ の相互相関関数 (cross-correlation function) および共分散関数 (covariance function) は

$$\begin{aligned} R_{x_i x_j}(t, t + \tau) &= E[x_i(t)x_j(t + \tau)] \\ &= \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x_i(t)x_j(t + \tau)p(x_i(t), x_j(t + \tau))dx(t)dx(t + \tau) \end{aligned} \quad (18)$$

$$C_{x_i x_j}(t, t + \tau) = E[\{x_i(t) - m_{x_i}(t)\}\{x_j(t + \tau) - m_{x_j}(t)\}] \quad (19)$$

で定義される．任意の t, τ について $C_{x_i x_j}(t, t + \tau) = 0$ が成立するとき， $x_i(t)$ と $x_j(t)$ は無相関であるという．また，確率過程 $x_i(t), x_j(t)$ の同時確率密度関数について

$$p(x_i(t), x_j(t + \tau)) = p(x_i(t))p(x_j(t + \tau)) \quad (20)$$

が常に成立するとき， $x_i(t)$ と $x_j(t)$ は独立であるという．

1.3 キュムラント (累積数)

確率変数 x の k 次モーメント M_k およびモーメント母関数 (moment generating function) $G(\xi)$ は

$$M_k = E[x^k] = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x^k p(x) dx \quad (21)$$

$$G(\xi) = E[e^{x\xi}] = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} e^{x\xi} p(x) dx \quad (22)$$

で定義される． $G(\xi)$ を $x\xi = 0$ においてマクローリン展開すると

$$e^{x\xi} = 1 + x\xi + \frac{1}{2!}(x\xi)^2 + \frac{1}{3!}(x\xi)^3 + \dots \quad (23)$$

であるから，

$$G(\xi) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!} M_k \xi^k \quad (24)$$

と書ける．

モーメント母関数を ξ で n 階微分すると，

$$\begin{aligned} \frac{d^n G(\xi)}{d\xi^n} &= \frac{d^n}{d\xi^n} \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} e^{x\xi} p(x) dx = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{x\xi} p(x) dx \\ &= \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x^n e^{x\xi} p(x) dx \end{aligned} \quad (25)$$

であるから， $\xi = 0$ において

$$\left. \frac{d^n G(\xi)}{d\xi^n} \right|_{\xi=0} = \int_{-\text{inf}}^{\text{inf}} x^n p(x) dx = M_k \quad (26)$$

となる．すなわち， $\xi = 0$ におけるモーメント母関数の n 階微係数は n 次モーメントに等しい．

いま，モーメント母関数の対数を取り，

$$c(\xi) = \log G(\xi) \quad (27)$$

とおくと，確率変数 x の n 次のキュムラント (cumulant) κ_n は

$$\kappa_n = \left. \frac{d^n c(\xi)}{d\xi^n} \right|_{\xi=0} \quad (28)$$

で定義される．このため， $c(\xi)$ はキュムラント母関数と呼ばれる．例えば，1次キュムラントは

$$\kappa_1 = \left. \frac{dc(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi=0} = \left. \frac{d}{d\xi} \log G(\xi) \right|_{\xi=0} = \frac{1}{G(\xi)} \left. \frac{dG(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi=0} = M_1 \quad (29)$$

となり，同様に2次キュムラントは

$$\kappa_2 = \left. \frac{d^2 c(\xi)}{d\xi^2} \right|_{\xi=0} = \left. \frac{d}{d\xi} \left(\frac{1}{G(\xi)} \frac{dG(\xi)}{d\xi} \right) \right|_{\xi=0} = M_2 - M_1^2 \quad (30)$$

と計算される．さらに高次のキュムラントについては

$$\kappa_3 = M_3 - 3M_2M_1 + 2M_1^3 \quad (31)$$

$$\kappa_4 = M_4 - 4M_3M_1 - 3M_2^2 + 12M_2M_1^2 - 6M_1^4 \quad (32)$$

となる．なお，確率変数 x の平均値がゼロである場合，すなわち $M_1 = 0$ である場合には，

$$\kappa_1 = 0 \quad (33)$$

$$\kappa_2 = M_2 \quad (34)$$

$$\kappa_3 = M_3 \quad (35)$$

$$\kappa_4 = M_4 - 3M_2^2 \quad (36)$$

となる．このとき， $\kappa_2 = M_2$ は分散であり，分布のばらつきを表す． $\sigma^2 = M_2$ とすると， $\kappa_3/\sigma^3 = M_3/\sigma^3$ は歪度 (skewness) と呼ばれ，分布の非対称性を表す．また， $\kappa_4/\sigma^4 = M_4/\sigma^4 - 3$ は尖度 (kurtosis) と呼ばれる．4次中心モーメントは値の一部に他とかけはなれたものがあれば大きくなり，分布がかたまっていけば小さくなる．したがって，その値はヒストグラムの形状が中央が尖っていて両側に長く尾を引いていけば大きくなり，一方，中央が平らで両端が切れていけば小さくなる．これより，尖度は分布のすその長さを表す．正規分布については，3次以上のキュムラントはすべてゼロとなるため，それらを正規分布からのずれを表す指標として用いることができる．

1.4 独立性の基準

独立成分分析で取り扱われる時系列は，強定常，弱定常，非定常 (nonstationary) のいずれかに分類される．時系列が強定常である場合には，確率分布が時不変であるため，この確率分布に基づいて独立性を判断することができる．キュムラントを利用して独立成分を計算する手法はこれにあたる．次に，時系列が弱定常でしかない場合には，3次以上の統計量が時間的に変化してしまうため，それらを1つの見本過程から推定することはできない．したがって，高次統計量に基づく方法は利用できない．さらに，非定常ともなると，問題は極めて困難なものとなる．

2 独立成分分析

4次のキュムラントに基づいて独立成分分析を行う方法について解説する．ここで述べるアルゴリズムは”Fast ICA”と呼ばれているもので，独立成分の導出に際して不動点法 (fixed point algorithm) を用いる．

2.1 問題設定

独立成分分析の目的は、複数の観測される変数を統計的に独立な変数の線形結合として表現することにある。観測変数から計算される独立な変数が独立成分である。いま、観測変数を x_1, x_2, \dots, x_m とし、この観測変数が未知の独立変数 s_1, s_2, \dots, s_n の線形結合で与えられると仮定する。なお、独立変数 s_i は互いに統計的に独立であり、その平均値はゼロとする。また、 $m \geq n$ とする。観測変数と独立変数を

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_m \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{m \times 1} \quad (37)$$

$$\boldsymbol{s} = \begin{bmatrix} s_1 & s_2 & \cdots & s_n \end{bmatrix}^T \in \mathbb{R}^{n \times 1} \quad (38)$$

とベクトルで表現すると、

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{s} \quad (39)$$

と書ける。ここで、 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ は未知のフルランク行列であり、混合行列と呼ばれる。観測変数ベクトル \boldsymbol{x} の時刻 t における値を $\boldsymbol{x}(t)$ とし、これが未知の独立成分 $\boldsymbol{s}(t)$ と未知の混合行列 \boldsymbol{A} によって $\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(t)$ で与えられるならば、サンプル数を k とおいて、

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{S} \quad (40)$$

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}(1) & \boldsymbol{x}(2) & \cdots & \boldsymbol{x}(k) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times k} \quad (41)$$

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{s}(1) & \boldsymbol{s}(2) & \cdots & \boldsymbol{s}(k) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times k} \quad (42)$$

と表すことができる。これより、独立成分分析とは、独立成分および混合行列に関する知識を一切利用せずに、観測データ行列 \boldsymbol{X} から独立成分を表す行列 \boldsymbol{S} を推定する手法、あるいは観測変数 \boldsymbol{X} から混合行列 \boldsymbol{A} を推定する手法であると言える。ただし、独立成分と混合行列の推定には任意性が残る。すなわち、観測データ行列 \boldsymbol{X} のみから、ある行列 $\boldsymbol{W} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ を用いて、

$$\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{X} \quad (43)$$

で計算される復元データ \boldsymbol{Y} の各成分が互いに統計的に独立となるような \boldsymbol{W} を求めるのが独立成分分析であり、理想的には、 \boldsymbol{A}^+ を \boldsymbol{A} の一般化逆行列として

$$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{A}^+ \quad (44)$$

となれば良い。しかし、独立成分および混合行列に関する情報が一切利用できないのであるから、復元される成分の大きさと符号、そして順序には任意性が残ることになる。

2.2 前処理としての無相関化 (sphering)

観測変数の数が独立変数の数よりも多いならば、仮定より観測変数は線形従属であり、復元行列 \boldsymbol{W} は低次元化を行う行列となる。また、変数が互いに独立であれば、それらは無相関でもあるため、復元行列 \boldsymbol{W} は変数を無相関化する行列でもある。無相関化とそれに伴う低次元化を同時に行う統計的手法に主成分分析がある。このため、独立成分分析の前処理として主成分分析が利用されることが多い。

観測データ行列 $\boldsymbol{X} \in \mathbb{R}^{m \times k}$ の特異値分解

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{V}^T \quad (45)$$

を考える。ここで、 $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ と $\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ は直交行列であり、

$$\boldsymbol{S} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{S}_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m \times k} \quad (46)$$

$$\boldsymbol{S}_r = \text{diag}(s_1, s_2, \dots, s_r) \quad (47)$$

である．なお， r は行列 X のランクである．ここで，

$$\tilde{X} = U^T X = SV^T \quad (48)$$

という変換を考えると，変換後データ行列 \tilde{X} の共分散行列は

$$C_{\tilde{X}} = \frac{1}{k-1} \tilde{X} \tilde{X}^T = \frac{1}{k-1} SV^T (SV^T)^T = \frac{1}{k-1} SS^T = \Sigma \quad (49)$$

となる．ここで，

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \Sigma_r & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \in \mathfrak{R}^{m \times m} \quad (50)$$

$$\Sigma_r = \frac{1}{k-1} \text{diag}(s_1^2, s_2^2, \dots, s_r^2) \quad (51)$$

である．すなわち，共分散行列が対角行列であることから，変換後の変数は互いに無相関となっている．また， $m-r$ 個の変換後の変数の分散がゼロであり，これらの変数は一切情報を持たないことから， U^T の r 行目までを変換に用いることにより， m 次元の変数ベクトルを r 次元へと低次元化できることがわかる．この変換後の変数 \tilde{x}_i を主成分と呼ぶ．

独立成分分析の前処理としては，共分散行列が単位行列となるような変換を行う．すなわち，Eq.(48) の代わりに，

$$\check{X} = S_r^{-1} U_r^T X \quad (52)$$

という変換を行う．ここで， U_r は U の r 列目までで構成される行列である．以下では，この変換行列を

$$M = S_r^{-1} U_r^T \quad (53)$$

と書くことにする．

行列 M を用いて観測変数 x_i の無相関化を行う場合， $B = MA$ として次式を得る．

$$\tilde{x} = Mx = MA s = B s \quad (54)$$

ここで， s_i は独立変数であり，変換後の変数 \tilde{x}_i は無相関であることから，

$$E[\tilde{x} \tilde{x}^T] = BE[ss^T]B^T = BB^T = I \quad (55)$$

となる．ただし，一般的に $E[ss^T] = I$ とはなりえないが，独立成分分析では s_i の大きさと符号の任意性は残るため， $E[ss^T] = I$ であるとした．以上より， $B \in \mathfrak{R}^{n \times n}$ は直交行列であり， $n = r$ が成り立つ．以上より，独立成分分析は，任意のフルランク行列 A を推定する問題から，直交行列 B を推定する問題に変換される．

2.3 4次キュムラントと独立性

独立成分分析を行う際，4次キュムラントが利用される場合が多い．ここでは，4次キュムラントと独立性の関係について簡単に述べる．

平均値ゼロの確率変数 z の4次キュムラントは

$$\kappa_4(z) = E[z^4] - 3E[z^2]^2 \quad (56)$$

で定義される．4次キュムラントについて，2つの確率変数 z_1, z_2 が独立であれば

$$\kappa_4(a_1 z_1 + a_2 z_2) = a_1^4 \kappa_4(z_1) + a_2^4 \kappa_4(z_2) \quad (57)$$

が成り立つ．

簡単のため，未知の独立変数が2つである場合を考える．無相関化された観測変数は直交行列 B を用いて

$$\begin{bmatrix} \check{x}_1 \\ \check{x}_2 \end{bmatrix} = B \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \end{bmatrix} \quad (58)$$

で与えられる．ここで，ある単位ベクトル $w \in \mathfrak{R}^{2 \times 1}$ の方向に観測変数を射影し，すなわち

$$y = w^T \begin{bmatrix} \check{x}_1 \\ \check{x}_2 \end{bmatrix} = w^T B \begin{bmatrix} s_1 \\ s_2 \end{bmatrix} \quad (59)$$

として， y の4次キュムラントが最大（あるいは最小）となるように w を決定する問題を考える．ここで，

$$w^T B (w^T B)^T = 1 \quad (60)$$

であることから，

$$w^T B = \begin{bmatrix} \sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix} \quad (61)$$

とおいて差し支えない．このとき，

$$y = \sin \theta s_1 + \cos \theta s_2 \quad (62)$$

$$\kappa_4(y) = \sin^4 \theta \kappa_4(s_1) + \cos^4 \theta \kappa_4(s_2) \quad (63)$$

となる．いま， $\kappa_4(s_1) > \kappa_4(s_2)$ かつ $\kappa_4(s_1) > 0$ であるとすると，

$$\sin^4 \theta + \cos^4 \theta \leq 1 \quad (64)$$

であることに注意して， $\kappa_4(y)$ は $\sin^4 \theta = 1$ のときに最大となることがわかる．このとき，

$$w^T B = \begin{bmatrix} \pm 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (65)$$

となることから，

$$y = \pm s_1 \quad (66)$$

であり， y は独立成分に等しくなる．さらに，

$$w = B \begin{bmatrix} \pm 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (67)$$

となることから，符号の任意性を残して， w は直交行列 B の第1列に等しい．

あるいは，以下のように考えてもよい．4次キュムラント $\kappa_4(y)$ が最大あるいは最小となるための必要条件は

$$\frac{d\kappa_4(y)}{d\theta} = 4 \sin^3 \theta \cos \theta \kappa_4(s_1) - 4 \cos^3 \theta \sin \theta \kappa_4(s_2) = 0 \quad (68)$$

であり， $\sin \theta = 0$ あるいは $\cos \theta = 0$ であれば $\kappa_4(y)$ は極値となることがわかる．このとき， $y = \pm s_1$ あるいは $y = \pm s_2$ であるから， y は独立成分に等しくなる．なお，すべての確率変数が正規分布に従う場合には， $\kappa_4(y) = 0$ となるため，独立成分を求めることはできない．

2.4 独立成分の計算

復元される変数の4次キュムラントは

$$\kappa_4(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}}) = E[(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^4] - 3E[(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^2]^2 = E[(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^4] - 3(\mathbf{w}^T \mathbf{w})^2 \quad (69)$$

で与えられる．制約条件を $\|\mathbf{w}\| = 1$ として，ラグランジュ乗数 λ を用いると，目的関数 $J(\mathbf{w}, \lambda)$ は

$$J(\mathbf{w}, \lambda) = E[(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^4] - 3\|\mathbf{w}\|^4 + \lambda(\|\mathbf{w}\|^2 - 1) \quad (70)$$

で与えられる．この目的関数を \mathbf{w} および λ でそれぞれ偏微分すると，

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{w}} = E[4(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \tilde{\mathbf{x}}] - 12\|\mathbf{w}\|^2 \mathbf{w} + 2\lambda \mathbf{w} = 0 \quad (71)$$

$$\frac{\partial J}{\partial \lambda} = \|\mathbf{w}\|^2 - 1 = 0 \quad (72)$$

が目的関数 $J(\mathbf{w}, \lambda)$ を最大あるいは最小とするための必要条件となる²．勾配法を用いると， \mathbf{w} の更新アルゴリズムは

$$\begin{aligned} \mathbf{w}(k+1) &= \mathbf{w}(k) \pm \mu \frac{\partial J}{\partial \mathbf{w}} \\ &= \mathbf{w}(k) \pm \mu \{E[4(\mathbf{w}(k)^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \tilde{\mathbf{x}}] - 12\|\mathbf{w}(k)\|^2 \mathbf{w}(k) + 2\lambda \mathbf{w}(k)\} \end{aligned} \quad (73)$$

で与えられる．ここで， μ は学習速度を表すパラメータである．期待値の代わりに各時刻での値を用いる場合には，更新アルゴリズムは

$$\mathbf{w}(k+1) = \mathbf{w}(k) \pm \mu \{4(\mathbf{w}(k)^T \tilde{\mathbf{x}}(k))^3 \tilde{\mathbf{x}}(k) - 12\|\mathbf{w}(k)\|^2 \mathbf{w}(k) + 2\lambda \mathbf{w}(k)\} \quad (74)$$

となる．この更新アルゴリズムを用いて復元ベクトル \mathbf{w} を求めることができる．しかし，パラメータ μ の与え方によっては，学習が非常に遅くなったり，収束しなかったりする．

Eq. (73) で与えられる更新アルゴリズムを用いる代わりに，不動点法を用いて復元ベクトル \mathbf{w} を求める方法がある．Eq. (73) において収束時には

$$E[4(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \tilde{\mathbf{x}}] - 12\|\mathbf{w}\|^2 \mathbf{w} + 2\lambda \mathbf{w} = 0 \quad (75)$$

が成り立つ．この等式に基づいて，

$$\mathbf{w} = \frac{-2}{\lambda} \{E[(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \tilde{\mathbf{x}}] - 3\|\mathbf{w}\|^2 \mathbf{w}\} \quad (76)$$

という形の更新アルゴリズムを考える．ここで， $\|\mathbf{w}\| = 1$ でなければならないので，重要なのは \mathbf{w} の方向のみである．すなわち，Eq. (76) 右辺の定数 $\frac{-2}{\lambda}$ について考慮する必要はなく，更新された \mathbf{w} を逐次標準化すればよい．したがって，実際の更新アルゴリズムは以下ようになる．

< 1つの独立成分を求めるアルゴリズム >

²ベクトルによる偏微分については

$$\frac{\partial J}{\partial \mathbf{w}} = \left[\frac{\partial J}{\partial w_1} \quad \frac{\partial J}{\partial w_2} \quad \dots \quad \frac{\partial J}{\partial w_n} \right]^T$$

と定義した．このとき，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} E[(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^4] &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} (\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^4 p(\tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}} = \int_{-\infty}^{\infty} 4(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \frac{\partial \mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}}}{\partial \mathbf{w}} p(\tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} 4(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \tilde{\mathbf{x}} p(\tilde{\mathbf{x}}) d\tilde{\mathbf{x}} = E[4(\mathbf{w}^T \tilde{\mathbf{x}})^3 \tilde{\mathbf{x}}] \end{aligned}$$

となる．

1. 初期値 $w(0)$ を与え, $k = 0$ とおく. ただし, $\|w(0)\| = 1$ である.
2. 次式により w を更新する. なお, 期待値は標本平均で代用する.

$$w(k+1) = E[(w(k)^T \tilde{x})^3 \tilde{x}] - 3w(k) \quad (77)$$

3. $w(k+1)$ を標準化し, $\|w(k+1)\| = 1$ とする.
4. $|w(k+1)^T w(k)|$ が十分に 1 に近ければ計算を終了し, そうでなければ $k = k+1$ としてステップ 2 へ戻る.

n 個の独立成分を推定するためには, 上記アルゴリズムを n 回繰り返す必要がある. ただし, 毎回異なる独立成分を求めるために,

$$w_i^T w_j = 0 \quad (i \neq j) \quad (78)$$

であることを利用する. すなわち, i 番目の独立成分を推定する際には, 更新された w_i を既に求めたすべての独立成分 $w_j (j = 1, 2, \dots, i-1)$ と直交する部分空間に射影する. ここで,

$$B_{i-1} = \begin{bmatrix} w_1 & w_2 & \dots & w_{i-1} \end{bmatrix} \quad (79)$$

とおくと, 独立成分分析の計算アルゴリズムは以下のようにまとめられる.

< 独立成分分析の計算アルゴリズム >

1. 観測データ X を $\tilde{X} = MX$ により無相関化し, $i = 1$ とおく.
2. 初期値 $w_i(0)$ を与え, $k = 0$ とおく. ただし, $\|w_i(0)\| = 1$ である. $i \geq 2$ であれば,

$$w_i(0) = w_i(0) - B_{i-1} B_{i-1}^T w_i(0) \quad (80)$$

によって $w_i(0)$ を射影し, さらに $\|w_i(0)\| = 1$ となるように標準化する.

3. 次式により w_i を更新する. なお, 期待値は標本平均で代用する.

$$w_i(k+1) = E[(w_i(k)^T \tilde{x})^3 \tilde{x}] - 3w_i(k) \quad (81)$$

4. $w_i(k+1)$ を

$$w_i(k+1) = w_i(k+1) - B_{i-1} B_{i-1}^T w_i(k+1) \quad (82)$$

によって射影し, さらに $\|w_i(k+1)\| = 1$ となるように標準化する.

5. $|w_i(k+1)^T w_i(k)|$ が十分に 1 に近ければ次に進み, そうでなければ $k = k+1$ としてステップ 3 へ戻る. なお, 収束判定には内積ではなく, $\|w_i(k+1) \pm w_i(k)\|$ を利用しても良い.
6. 第 i 番目の独立成分の方向ベクトルを $w_i = w_i(k+1)$ とし, $i = i+1$ としてステップ 2 へ戻る. なお, $i = n$ で終了する.

最終的に求められた行列 $B = B_n$ を用いて,

$$Y = B^T \tilde{X} = B^T M X \quad (83)$$

により各変数が互いに独立なデータ行列 Y を得る.

3 プログラムと計算例

前節で述べた計算アルゴリズムを MATLAB 上で実現し，独立成分分析を行った．作製したプログラムと共に，計算結果を示す．

3.1 プログラム

作製したプログラムを以下に示す．なお，このプログラムではデータ行列の各行がサンプル（時刻）に，各列が変数に対応している．このようにしたのは，過去に作製した各種データ解析プログラムとの整合性を優先したためであり，本質的な違いはない．

```
function [Y,W,B,M] = ica(X,numIC,econv,max_itr)
% -----
% *** Independent Component Analysis ***
% Coded by Manabu KANO, Kyoto Univ., Feb. 6, 2001
%           last updated : Feb. 7, 2001
%
% USAGE :
% [Y,W,B,M] = ica(X,numIC,econv,max_itr);
%
% DESCRIPTION :
% This function executes ICA (Independent Component
% Analysis). The algorithm is based on 4th order
% cumulant and fixed-point algorithm.
%
% --- Input ---
% X : data matrix (samples*variables)
%   ( option )
% numIC : number of independent components
%        calculated
% econv : maximum error for convergence
% max_itr : maximum number of iteration
%
% --- Output ---
% Y : independent component
% W : inverse of mixing matrix
% B : orthogonal matrix
% M : sphering matrix
%
% X = U*S*V' ; Y = UB = XMB = XW
%
% -----

%----- Initialization -----
if nargin < 5, display = 0; end
if isempty(display), display = 0; end
```

```

if nargin < 4, max_itr = 1000; end
if isempty(max_itr), max_itr = 1000; end

if nargin < 3, econv = 0.00001; end
if isempty(econv), econv = 0.00001; end

if nargin < 2, numIC = 0; end
if isempty(numIC), numIC = 0; end
[rowX,colX]=size(X);
if numIC==0 | numIC>rank(X), numIC=rank(X); end

%----- Sphering with PCA -----
[U,S,V] = svd(X,0);
Sdiag = diag(S(1:numIC,1:numIC));
Sdiag0 = find(Sdiag==0);
for i=1:length(Sdiag0)
    Sdiag(1,Sdiag0(i)) = inf;
end
M = V(:,1:numIC)*diag(1./Sdiag)*sqrt(rowX); % sphering matrix
U = U(:,1:numIC)*sqrt(rowX); % normalized PCs (scores)
clear S V Sdiag Sdiag0

%----- ICA -----
B = [];
itr_fail = 0;
i = 1;
while i<=numIC
    w_old = rand(numIC,1)-0.5;
    if i>1, w_old = w_old-B*B'*w_old; end
    w_old = w_old/norm(w_old);
    for itr=1:max_itr
        w = (U'*((U*w_old).^3))/rowX-3*w_old;
        if i>1
            w = w-B*B'*w;
        end
        w = w/norm(w);
        if min(norm(w-w_old),norm(w+w_old))<econv
            itr_fail = 0;
            i = i+1;
            B = [B w];
            break
        end
        w_old = w;
    end
    if itr==1000

```

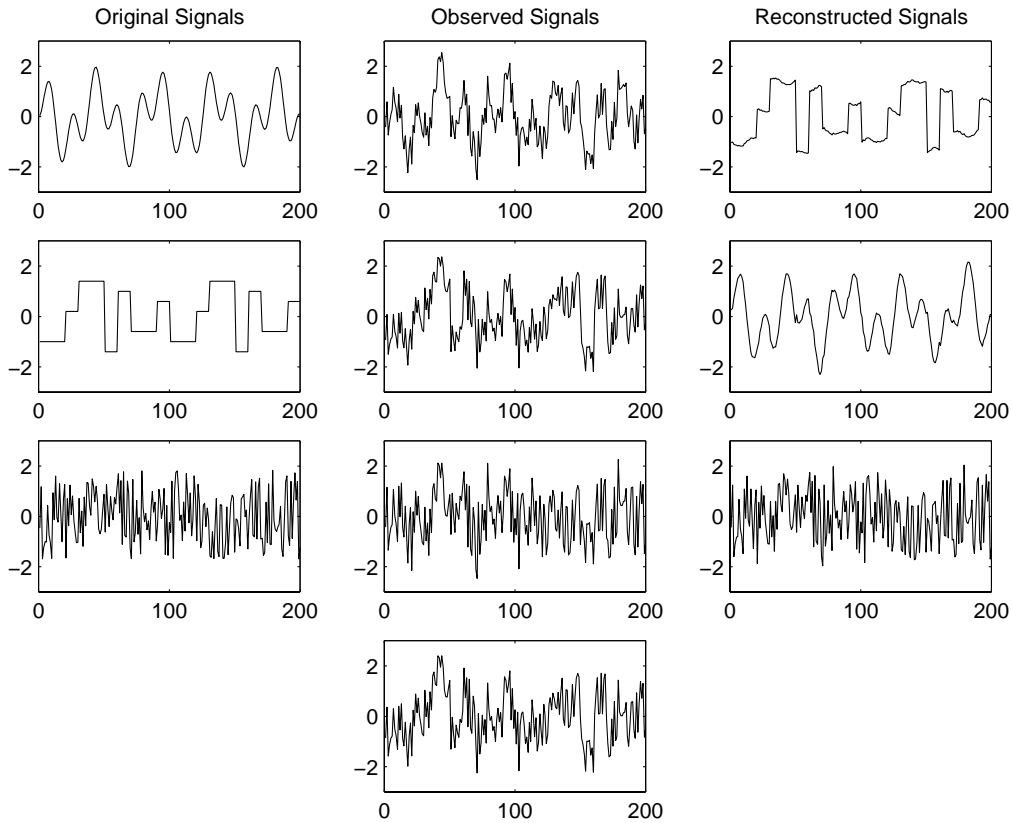


Fig. 1 独立成分分析の計算結果

```

itr_fail = itr_fail+1;
if itr_fail==5, error('Convergence failed!!!'), end
break
end
end
end

%----- Result -----
Y = U*B;
W = M*B;

%
% Copyright (c) 2001. Manabu KANO
% e-mail: kano@cheme.kyoto-u.ac.jp
%
```

3.2 計算例

計算例を Fig. 1 に示す．左端の 3 図が元信号，中央の 4 図が観測信号，右端の 3 図が得られた独立成分に対応する．すなわち，混合行列 A が非正方行列の場合を対象とした．階段状の元信号の復元状態が悪い

ように感じるが、概ね良好に独立成分が復元できたと判断してよい。この程度の問題であれば、計算時間は一瞬である。

4 おわりに

数多くある独立成分分析の計算方法の中で、4次キュムラントを用いる方法について解説した。主成分分析を理解できている読者ならば、本レポートを参考にして独立成分分析の初歩を修得できるだろう。最後になるが、Eq. (83) から明らかなように、独立成分 Y は観測データ X の主成分 MX を直交行列 B^T によって回転させることによって得られる。読者が、この最後の1文に到達できることを祈る。