What と How：部分空間法の歴史から学ぶもの

小川　英光[†]

† 東京福祉大学教育学部　〒372-0831 群馬県伊勢崎市山王町 2020-1
E-mail: †hidemitsu-ogawa@kuramae.ne.jp

あらまし　我々が研究を進めていく上で最も重要なことは，問題をどのようにして解くか（How）ではなく，どのような問題を論じるか（What）ということである．問題を定式化する際には，問題の解き方や計算の仕方を紛れ込ませることなく，何をしたいかだけを明確にして事に当たることが重要である．部分空間法の歴史に例をとりながら，What と How を切り分けることが如何に困難であるか，また，両者を混同するとどのような問題が生じるか，両者を切り分けるためにはどうすればよいかという問題について論じる．

キーワード　部分空間法，K-L 展開，K-L 部分空間，K-L 固有元，what と how

What and How: Message from a History of Subspace Methods

Hidemitsu OGAWA[†]

† School of Education, Tokyo University and Graduate School of Social Welfare
Sanno-cho 2020-1, Isesaki, Gunma, 372-0831 Japan
E-mail: †hidemitsu-ogawa@kuramae.ne.jp

Abstract　The key to doing good research often lies not in the method to solve a problem, i.e., *how* of the problem but in making clear the exact problem to be solved, i.e., the *what* of the problem; and the ability to clearly distinguish between these two components during problem formulation. By using examples from a history of research on subspace methods, we discuss how difficult it is to keep *what* and *how* separate, illustrate the consequences of confusing them, and provide tips to clearly distinguish between these two fundamental components of problem solving.

Key words　Subspace method, K-L expansion, K-L subspace, K-L eigenelement, what and how

1. はじめに

我々が研究を進めていく際に最も重要なことは，問題をどのようにして解くか（How）ではなく，どのような問題を論じるか（What）ということである．

「問題の定式化と問題の解き方は同時に決まる」と言われることがあるが，それは間違いである.「解き方」に対す意識が少しでも心の中にあれば，問題を定式化する際に，その心の中の「解き方」に無意識のうちに引きずられてしまい，表面的な定式化，複雑な定式化，あるいは間違った定式化を行ってしまう．

逆に，正しい問いかけをすれば，解き方も自然に湧き出てきて，意外に容易に正しい答えに到達できる場合もあるのである．そのような例は，歴史に残る重要な研究でも多く見ることができる(注1)．幸か不幸か，部分空間法の歴史においても，同様な例をみることができる．そこで本論文では，部分空間法の問題を例にとりながら，What と How を切り分けることが如何に重要であるかという問題を論じることにする．

Karhunen-Loève 展開（K-L 展開）は，パターン認識や画像処理の分野に定着している概念である．ほとんどの標準的書籍 [1]– [14] にその記述が見られる．しかし，それらの書籍 [2]– [14] 及び論文 [15]– [17] を注意深く読んでみると，意外にも，不完全な記述しかなされていないことに驚かされる．

不完全という意味には二つある．第一は，K-L 展開の意味づけの問題である．ほとんどの文献 [2]– [17] では，直接・間接に

(注1)：一例を示す．ハイゼンベルグは，1925 年に量子力学の理論を作った後，霧箱の中の電子の軌跡をどう記述すればよいかという問題で 2 年間も苦しんだ．ボーアとの激しい議論が続いた後，疲れ果てて星空の下の公園を散策しているとき，アインシュタインに初めて会ったときに言われた言葉，すなわち,「我々が自然界を認識することは，理論という枠組みをとおして初めて可能になるのだ.」という言葉をふと思い出した．そして,「霧箱の中の電子の軌跡をどう記述するか」と問うのではなく,「量子力学の理論で何が分かるのか」という問いかけをした．するとたちまち，不確定性関係が導かれ，あの不確定性原理が生まれたのである [26]．

「パターン集合を最良に近似できるものは K-L 展開だけであり，それ以外の直交系では無理である」という表現がとられている．これを本論文では，「K-L 展開の必要十分性」と呼ぶことにする．

ところで，よく知られているように，K-L 展開を N 項で打ち切った場合，この n 個の固有元（これを以下では K-L 固有元と呼ぶ）の線形和で表現できるパターンは，その固有元が張る部分空間の中の任意の正規直交基底を使って完全に表現できる．しかも，それらの直交基底は必ずしも K-L 固有元になっていないのである．したがって，K-L 展開は十分であるが，必要ではないのである．本質的な意味を持っているものは，K-L 固有元そのものではなく，K-L 固有元によって張られる部分空間である．

ところが，ほとんどの書籍では，K-L 展開は，特徴抽出に関する章の中で論じられている．そこでは，次のような表現がとられている．すなわち，「ある直交系でパターンを展開したとき，その展開係数からできるベクトルを特徴ベクトルと呼び，そのとき使った直交系を特徴軸と呼ぶ．そして，あるパターン集合を最良に近似する特徴軸が，その集合に対する K-L 固有元である.」という表現がとられている．そこでは，軸そのものが重要な意味を持っている．しかし，すぐ上で述べたように，パターンの近似を論じるときには，軸そのものは何も本質的な意味を持っておらず，その軸によって張られる部分空間が重要である．したがって，特徴軸という概念そのものが，この文脈では意味をなさなくなるのである．

K-L 展開に関する第二の問題は，証明の不完全さである．これらの文献の中には，あたかも K-L 展開が必要十分であるかのごとき表現をとりながら，十分性しか証明していないもの，しかも，その十分性の証明が不完全なもの，必要性まで証明してしまったもの等々がある．前述のごとく，パターン集合の近似という立場からみたとき，K-L 展開は十分条件になっているが，必要条件にはなっていない．したがって，もし必要条件を証明できたとしたら，その証明は間違っていることになる．

本論文では，部分空間法における基本定理ともいうべき問題を整理し，その証明に挑んだいくつかの事例をとおして，なぜ従来多くの研究者が間違いを繰り返してきたのか，なぜその間違いに気づかなかったのか，間違いを起さないようにするためにはどうすればよいか，という問題について論じることにする．

2. 問題の定式化

議論の対象になるパターンが属する空間を H で表す．H は複素ヒルベルト空間になっているものとする(注2)．したがって，H の元はベクトルになることもあるし，関数になることもある．さらに，音声のように１変数関数のこともあるし，文字や画像のように２変数関数になることもある．それらを一般的に f で表すことにする．

認識対象になるカテゴリを任意に１つ固定し，Ω で表す．パターン集合 Ω (注3) を最良に近似する部分空間を求めることが，部分空間法における最も基本的な課題である．

Ω の相関作用素を R で表す．R は，ヒルベルト空間の言葉を使って，次のように定義される．

$$R = E(f \otimes \overline{f}) \tag{1}$$

ここで，E は $f \in \Omega$ に関する平均である．$f \otimes \overline{f}$ は，ノイマン・シャッテン積と呼ばれるものであり，一般の $f, g \in H$ と $h \in H$ に対して，

$$(f \otimes \overline{g})h = \langle h, g \rangle f \tag{2}$$

によって定義される [22]．式 (2) の右辺の $\langle h, g \rangle$ は，H における内積である．なお，式 (2) の g の上についている横棒は，複素共役の意味ではなく，ノイマン・シャッテン積の記号の一部である．

相関作用素 R は半正値自己共役作用素であり，任意の $\phi \in H$ に対して，次の関係が成立している．

$$E|\langle f, \phi \rangle|^2 = \langle R\phi, \phi \rangle \tag{3}$$

R の固有値，及び，大きさを 1 に正規化した固有元を λ_n, φ_n で表す：

$$R\varphi_n = \lambda_n \varphi_n \qquad : \lambda_1 \geqq \lambda_2 \geqq \cdots \geqq 0 \tag{4}$$

$\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ に関する f の展開は，Karhunen-Loève 展開，あるいは K-L 展開と呼ばれる．そこで，$\{\varphi_n\}_{n=1}^{\infty}$ を K-L 固有元と呼ぶことにする．

カテゴリ Ω を近似する部分空間として，２種類の重要な部分空間を導入する．第１はカテゴリ Ω を最良に近似する M 次元部分空間であり，S_0 で表す．第２は，R の固有値の大きな方から選んだ M 個の K-L 固有元 $\{\varphi_n\}_{n=1}^{M}$ で張られる部分空間であり，S_{KL} で表す．この空間を K-L 固有空間と呼ぶことにする．

部分空間 S_0 として S_{KL} がよく使われるが，その理論的根拠は，次の定理による．

［**定理** 1］ (部分空間法における基本定理) カテゴリ Ω を最良に近似する M 次元部分空間は S_{KL} であり，S_{KL} に限る．すなわち，$S_0 = S_{\mathrm{KL}}$ である．

本論文は，この定理にまつわる出来事から得られる貴重な教訓について論じたものである．

3. 従来の証明法とその問題点

定理 1 の従来から行われている証明を２種類紹介し，その問題点を明らかにする．

部分空間は，その空間を張るような正規直交系によって表すことができる．したがって，

『S_0を張るような正規直交系が $\{\varphi_n\}_{n=1}^{M}$になる』 (5)

ことを示すことが，従来とられてきた多くの証明の基本方針である．これから紹介する証明も，この方針に従っている．まず準備として，レイリーの原理を示す．

(注2)：実ヒルベルト空間の場合も，ほとんど平行した議論ができる．

(注3)：Ω はカテゴリを表す記号であり，f はヒルベルト空間 H の元であるから，本来別の概念である．しかし，混乱の恐れがないことと，記述を簡単にするために，Ω に属するパターンの全体も同じ記号 Ω で表し，「パターン集合 Ω」といったり，$f \in \Omega$ と表記することにする．

3.1 レイリーの原理

２次形式の最大値問題に関するレイリーの原理を述べる(注4)．

［**補題** 1］ (レイリーの原理) A を H 上の半正値自己共役作用素とする．A の固有値を大きさの順に並べて λ_n で表し，対応するノルムを１に正規化した固有元を u_n で表す：

$$Au_n = \lambda_n u_n \qquad : \lambda_1 \geqq \lambda_2 \geqq \cdots \geqq 0 \tag{6}$$

A の２次形式

$$J_1[\phi] = \frac{\langle A\phi, \phi\rangle}{\| \phi \|^2}$$

に対して，次の関係が成立する．ここで，$\| \phi \|$ は H におけるノルムである．

(i) 任意の $\phi \neq 0$ に対して，

$$J_1[\phi] \leqq J_1[u_1] = \lambda_1$$

となる．

(ii) $\{u_n\}_{n=1}^{m-1}$ に直交している $\phi \neq 0$ に対して，

$$J_1[\phi] \leqq J_1[u_m] = \lambda_m$$

となる．

3.2 逐次法（レイリーの原理による方法）

パターン認識関係の多くの書籍では，定理 1 が次のように証明されている．一般に，H の元 $\{f_n\}_{n=1}^{M}$ で張られる部分空間を $\mathcal{L}(\{f_n\}_{n=1}^{M})$ で表すことにする．例えば $S_{\mathrm{KL}} = \mathcal{L}(\{\varphi_n\}_{n=1}^{M})$ である．

(i) まず $M = 1$ の場合を考える．H に属するノルム１の元 ϕ で張られる１次元部分空間が Ω を最良に近似するように，すなわち，$\mathcal{L}(\{ \phi \}) = S_0$ となるように ϕ を決定する．$f \in H$ の $\mathcal{L}(\{ \phi \})$ への正射影成分は，ϕ のノルムが１であるから，$\langle f, \phi\rangle$ で与えられる．そこで，Ω に属するすべての f に関する２乗平均

$$J_2[\phi] = E|\langle f, \phi\rangle|^2 = < R\phi, \phi > \tag{7}$$

を考える．この式の第２の等号は，式 (3) によるものである．式 (7) を最大にする ϕ が，S_0 を張る正規直交系である．したがってレイリーの原理により，式 (7) は $\phi = \varphi_1$ に対して最大値 λ_1 をとる．よって，$S_0 = \mathcal{L}(\{\varphi_1\})$ である．

(ii) $M = 2$ の場合，レイリー の原理により，

$$\langle \phi, \varphi_1\rangle = 0 \tag{8}$$

なる条件のもとで，式 (7) は $\phi = \varphi_2$ に対して最大値 λ_2 をとる．よって，$S_0 = \mathcal{L}(\{\varphi_1, \varphi_2\})$ である．

(iii) 以下同様にして，一般の M に対して定理 1 が成立する．

■

この証明法において (i) は正しい．しかし，(ii) の最後の部分は，これだけでは正しい論理の進め方になっていない．すなわち，(ii) で主張していることは，

『$\phi = \varphi_2$ が，条件 (8) のもとで式 (7) を最大にする』

ということであって，

『Ω を最良に近似する 2 次元部分空間が $\mathcal{L}(\{\varphi_1, \varphi_2\})$ である』

ということは，論理的には何も示されていない．証明を完成させるためには，更に論理の詰めが必要である．

次節で述べる証明法は，この問題に直接答えようとしたものである．

3.3 直 接 法

本節で紹介する証明法は，Ω を最良に近似する M 次元部分空間 S_0 を張るような M 個の元からなる正規直交系を直接求めようとする試みである．$\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ を H の正規直交系とする．すなわち，

$$\langle \phi_m, \phi_n\rangle = \delta_{m,n} \qquad : 1 \leqq m, n \leqq M \tag{9}$$

とする．ここで $\delta_{m,n}$ はクロネッカーのデルタと呼ばれ，

$$\delta_{m,n} = \begin{cases} 1 & : \quad m = n \\ 0 & : \quad m \neq n \end{cases}$$

によって定義される．

この正規直交系 $\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ を使って Ω を最良に近似するためには，汎関数

$$J_3[\{\phi_n\}] = E\sum_{n=1}^{M} |\langle f, \phi_n\rangle|^2 \tag{10}$$

を最大にする $\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ を求めればよい．式 (3) より，式 (10) は

$$J_3[\{\phi_n\}] = \sum_{n=1}^{M} \langle R\phi_n, \phi_n\rangle \tag{11}$$

と表すことができる．したがって問題は，条件 (9) のもとで式 (11) を最大にする $\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ を求める問題になる．

ここで，式 (9) の条件を少し緩めて，

$$\| \phi_n \|^2 = 1 \qquad : 1 \leqq n \leqq M \tag{12}$$

だけを要請してみる．すなわち，式 (12) の条件のもとで式 (11) を最大にする $\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ を求める問題をまず解くことにする．

ラグランジュ未定乗数の組を $\{\lambda_n\}_{n=1}^{M}$ とすれば，式 (11) は，$\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ と $\{\lambda_n\}_{n=1}^{M}$ に関する条件なしの変分問題

$$J_3[\{\phi_n, \lambda_n\}] = \sum_{n=1}^{M} \langle R\phi_n, \phi_n\rangle - \sum_{n=1}^{M} \lambda_n (\| \phi_n \|^2 - 1) \tag{13}$$

に変換できる．

式 (13) を各 λ_n について微分し零とおけば，式 (12) を得る．式 (13) を各 ϕ_n について変分し零とおけば，R が自己共役であることから，

$$R\phi_n = \lambda_n \phi_n \qquad : 1 \leqq n \leqq M \tag{14}$$

となる．すなわち，λ_n 及び ϕ_n は，相関作用素 R の固有値と固有元になる．

そこで，何番目の固有元を採用すればよいかを調べる．式 (14) を式 (11) に代入すれば，式 (12) より，

(注4)：固有値を求めるための数値計算法の１つであるベキ乗法は，このレイリーの原理を使ったものである [24]．

$$J_3[\{\phi_n\}] = \sum_{n=1}^{M} \lambda_n \tag{15}$$

となる．よって，式 (15) の J_3 を最大にするためには，R の固有値の大きな方から M 個とればよい．すなわち，

$$\phi_n = \varphi_n \qquad : 1 \leqq n \leqq M \tag{16}$$

とすればよい．

式 (12) の条件のもとで式 (11) を最大にする問題を解いたところ，結果は自動的に式 (9) の条件を満たしていたのである．よって，式 (9) の条件のもとで式 (11) を最大にする ϕ_n は，式 (16) で与えられることになる． ■

こうして，$\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ が K-L 固有元でなければいけないこと，すなわち，K-L 展開の必要性が導かれた．しかし，式 (14) が導出されたこと自体が間違いなのである．実際，$\{\varphi_n\}_{n=1}^{M}$ を空間 S_{KL} の中で回転したものを $\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ として採用した場合，固有値 $\{\lambda_n\}_{n=1}^{M}$ がすべて縮退していない限り，$\{\phi_n\}_{n=1}^{M}$ はもはや R の固有元にはならない．しかし，空間そのものは $\mathcal{L}(\{\phi_n\}_{n=1}^{M}) = S_{\mathrm{KL}}$ と変化しないし，J_3 も，$J_3[\{\phi_n\}] = J_3[\{\varphi_n\}]$ と，同じ値をとるのである．

4. 厳密な証明

文献 [18] に従って，定理 1 の厳密な証明を与える．そのための準備として，まず，作用素に関するシュミットの内積，及び，相関作用素 R の不変部分空間についてまとめておく．

4.1 シュミットノルムとシュミットの内積

ヒルベルト空間 H 上の有界線形作用素 A を考える．$\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ を H の正規直交基底とする．

$$\sum_{n=1}^{\infty} \| Au_n \|^2$$

が有限な値をとるとき，その値は，正規直交基底 $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ の取り方によらず一定になる．その値の平方根を A のシュミットノルムといい，$\| A \|_2$ で表す [22] [23] (注5)：

$$\| A \|_2 = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \| Au_n \|^2 \right)^{1/2} \tag{17}$$

シュミットノルムが有限になるような有界線形作用素の全体を，シュミットクラスの完全連続作用素といい，$\sigma\mathrm{c}$ で表す [22]．

例えば，値域が有限次元になるような作用素は $\sigma\mathrm{c}$ に属す．しかし，恒等作用素は $\sigma\mathrm{c}$ に属さない．また，パターン認識の分野で重要な働きをするボケの変換は $\sigma\mathrm{c}$ に属すけれども，平行移動を行う作用素は $\sigma\mathrm{c}$ に属さない．このように，$\sigma\mathrm{c}$ は有界線形作用素の全体がなす空間の部分空間になっている．

$\sigma\mathrm{c}$ に属す作用素 A, B に対して，

$$\langle A, B \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} \langle Au_n, Bu_n \rangle \tag{18}$$

を定義することができる．右辺の内積は，ヒルベルト空間 H における内積である．右辺の総和の値は，正規直交基底 $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ の取り方によらず一定になる．そこで，$\langle A, B \rangle$ をシュミットの内積という [22] [23] (注6)．

作用素 A, B, X，及び，H の元 f に対して，次の公式が成立する．ただし，X^* は X の共役作用素である．

$$\langle AX, B \rangle = \langle A, BX^* \rangle \tag{19}$$

$$\langle XA, B \rangle = \langle A, X^* B \rangle \tag{20}$$

$$\langle A, B \rangle = \mathrm{tr}(AB^*) \tag{21}$$

$$\langle A, f \otimes \overline{f} \rangle = \langle Af, f \rangle \tag{22}$$

$$\| f \|^2 = \mathrm{tr}(f \otimes \overline{f}) \tag{23}$$

ここで，$\mathrm{tr}(A)$ は作用素 A のトレースであり，H の任意の正規直交基底 $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ を用いて，

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_{n=1}^{\infty} \langle Au_n, u_n \rangle \tag{24}$$

により定義される(注7)．この式の右辺が有限な値になれば，その値は $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ の取り方によらず一定になる．なお，$A \in \sigma\mathrm{c}$ であっても，$\mathrm{tr}(A)$ が存在しないことがある．しかし，A の値域が有限次元の場合，$\mathrm{tr}(A)$ が必ず存在するので，以下の議論では特に問題は生じない．

4.2 相関作用素 R の不変部分空間

S を H の閉部分空間とする．H 上の作用素 A に対して，

$$AS \subseteqq S \tag{25}$$

が成立するとき，すなわち，S の元を A で変換しても再び S に含まれるとき，S を A の不変部分空間という．相関作用素 R は自己共役であるから，次の補題が成立する．

(注5)：シュミットノルムは，行列に対するフロベニウスノルム [25]，すなわち，行列 $A = (a_{m,n})$ に対して

$$\| A \|_2 = \left(\sum_{m=1}^{N} \sum_{n=1}^{N} |a_{m,n}|^2 \right)^{1/2}$$

で定義されるノルムの拡張概念である．それは次のようにして分かる．$\mathbf{C}^N$ の標準基底を $\{\boldsymbol{e}_n\}_{n=1}^{N}$ で表す．すなわち，$\boldsymbol{e}_n$ は第 n 成分が 1 で，それ以外の成分が 0 となる N 次元ベクトルである．式 (17) で $H = \mathbf{C}^N$, $u_n = \boldsymbol{e}_n$ と置けば，フロベニウスノルムになる．

(注6)：シュミットの内積は，行列 $A = (a_{m,n})$, $B = (b_{m,n})$ に対して

$$\langle A, B \rangle = \sum_{m=1}^{N} \sum_{n=1}^{N} a_{m,n} \overline{b_{m,n}}$$

で定義される内積の拡張概念である．すなわち，この式は，式 (18) で $H = \mathbf{C}^N$, $u_n = \boldsymbol{e}_n$ と置いたものになっている．

(注7)：作用素のトレースは，行列 $A = (a_{m,n})$ に対して

$$\mathrm{tr}(A) = \sum_{n=1}^{N} a_{n,n}$$

で定義されるトレースの拡張概念である．すなわち，この式は，式 (24) で $H = \mathbf{C}^N$, $u_n = \boldsymbol{e}_n$ と置いたものになっている．

［**補題** 2］ （R の不変部分空間 1) [20] [21] H の閉部分空間 S が相関作用素 R の不変部分空間になるための必要十分条件は，

$$PR = RP \tag{26}$$

が成立することである．

［**補題** 3］ （R の不変部分空間 2) [19] H の閉部分空間 S が相関作用素 R の不変部分空間になるための必要十分条件は，S が R の固有元で張られる部分空間になることである．

4.3 厳密な証明

S を H の有限 M 次元部分空間とし，S への正射影作用素を P で表す．S と P は一対一に対応している．そこで，P に関する汎関数

$$J_4[P] = E \parallel Pf \parallel^2 \tag{27}$$

を考えることにする．定理 1 を証明するためには，式 (27) の $J_4[P]$ が最大になるための必要十分条件が $S = S_{\mathrm{KL}}$ であることを示せばよい．

まず，式 (27) をシュミットの内積を用いて表現する．ノイマン・シャッテン積に関して，

$$(Af) \otimes \overline{(Bg)} = A(f \otimes \overline{g})B^*$$

なる関係が成立している．よって，式 (27), (23), (1), (21) より，

$$\begin{aligned} J_4[P] &= E \parallel Pf \parallel^2 \\ &= E\mathrm{tr}[(Pf) \otimes \overline{(Pf)}] \\ &= E\mathrm{tr}[P(f \otimes \overline{f})P^*] \\ &= \mathrm{tr}[PE(f \otimes \overline{f})P^*] \\ &= \mathrm{tr}(PRP^*) \\ &= \langle PR, P \rangle \end{aligned}$$

となり，

$$J_4[P] = \langle PR, P \rangle \tag{28}$$

となる．

ところで，P が正射影作用素であること，すなわち，

$$P^2 = P, \ P^* = P \tag{29}$$

が成立することと，

$$P^*P = P \tag{30}$$

が成立することとは同値である．また，部分空間 S の次元が M であるということと，

$$\langle P, P \rangle = M \tag{31}$$

とは同値である．よって問題は，

『式 (30)，(31) を満たす P の中で式 (28) を最大にするものを求めよ.』

ということになる．

この条件付変分問題は，C と λ をそれぞれラグランジュ未定作用素，及び，ラグランジュ未定乗数とするとき，

$$\begin{aligned} J_4[P, C, \lambda] &= \langle PR, P \rangle + 2\langle C, P^*P - P \rangle \\ &\quad + \lambda(\langle P, P \rangle - M) \qquad (32) \\ &= \langle PR, P \rangle + 2(\langle PC, P \rangle - \langle C, P \rangle) \\ &\quad + \lambda(\langle P, P \rangle - M) \qquad (33) \end{aligned}$$

を最大にするような P と C と λ を求める条件なしの変分問題と等価になる．

そこで，式 (32)，(33) の変分問題を解くことにする．まず，式 (32) を C について変分し零とおけば，式 (30) が成立し，式 (29) が成立する．また，式 (32) を λ について微分し零とおけば，式 (31) が成立する．

次に，式 (33) を P について変分したものを δJ とおき，P の微小変化を δP で表せば，式 (29)，(19) より，

$$\begin{aligned} \delta J &= \langle \delta PR, P \rangle + \langle PR, \delta P \rangle \\ &\quad + 2\big(\langle \delta PC, P \rangle + \langle PC, \delta P \rangle - \langle C, \delta P \rangle\big) \\ &\quad + \lambda\big(\langle \delta P, P \rangle + \langle P, \delta P \rangle\big) \\ &= 2\Re(\langle P(R + C + C^* + \lambda P) - C, \delta P \rangle) \end{aligned}$$

となる．ここで $\Re(\cdot)$ は，複素数 $\cdot$ の実部を表す．よって，$\delta J = 0$ とおけば，

$$\langle P(R + C + C^* + \lambda P) - C, \delta P \rangle = 0$$

となる．この式の δP は任意の作用素であるから，

$$P(R + C + C^* + \lambda P) = C \tag{34}$$

となる．式 (34) を，この変分問題の正規方程式という．

次に，式 (34) より，

$$PR = RP \tag{35}$$

を導く．まず，式 (34) の左から P を掛けて，式 (29) を使えば，

$$PR + PC^* + \lambda P = 0 \tag{36}$$

となる．この式の両辺の共役をとれば，λ は実数であるから，式 (29) より

$$RP + CP + \lambda P = 0 \tag{37}$$

となる．一方，式 (34) の右から P を掛ければ

$$P(R + C + C^* + \lambda P)P = CP$$

となる．この式の左辺は自己共役であるから，右辺の CP も自己共役になる．よって，式 (29) を考慮すれば，

$$PC^* = CP \tag{38}$$

となる．式 (36)∼(38) より，確かに式 (35) が成立している．

式 (35) が成立したので，，補題 2，補題 3 より，S は R の K-L 部分空間，すなわち，R の固有元で張られる部分空間になる．そこで，何番目の固有元を採用すればよいかを調べる．R

の固有元を $\{\varphi_{m_n}\}_{n=1}^M$ とする．ここで $\{m_n\}_{n=1}^M$ は，M 個の相異なる自然数を表す．このとき，$\{\varphi_{m_n}\}_{n=1}^M$ で張られる部分空間 $\mathcal{L}(\{\varphi_{m_n}\}_{n=1}^M)$ への正射影作用素 P は，ノイマン・シャッテン積を用いて，

$$P = \sum_{n=1}^{M} (\varphi_{m_n} \otimes \overline{\varphi_{m_n}}) \tag{39}$$

と表すことができる．こうして問題は，式 (28) を最大にするような固有元の組 $\{\varphi_{m_n}\}_{n=1}^M$ を求める問題に帰着された．

以下，この問題を解くことにする．式 (28), (20), (30), (39), (22), (4) より

$$\begin{aligned} J_4[P] &= \langle PR, P\rangle \\ &= \langle R, P^*P\rangle \\ &= \langle R, P\rangle \\ &= \langle R, \sum_{n=1}^{M} (\varphi_{m_n} \otimes \overline{\varphi_{m_n}})\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{M} \langle R\varphi_{m_n}, \varphi_{m_n}\rangle \\ &= \sum_{n=1}^{M} \lambda_{m_n} \end{aligned}$$

となり，

$$J_4[P] = \sum_{n=1}^{M} \lambda_{m_n} \tag{40}$$

となる．λ_n は大きさの順に番号付けられているので，式 (40) を最大にするためには，

$$\{\lambda_{m_n}\}_{n=1}^M = \{\lambda_n\}_{n=1}^M \tag{41}$$

とおけばよい．これは $S_0 = S_{\mathrm{KL}}$ を意味している．よって，定理 1 が成立する． ■

なお，この証明の最後の部分は，「カテゴリ Ω を最良に近似する M 次元部分空間 S_0 は，R の固有元 $\{\varphi_n\}_{n=1}^M$ で張られる部分空間 S_{KL} と一致する」ということを主張しているのであり，「S_0 を張るような正規直交基底が $\{\varphi_n\}_{n=1}^M$ である」ということを主張しているのではないことは，注意を要する．

5. What と How

学問の発展という立場から見たとき，次の問題を考えてみることは大切である．

(i) なぜ間違いに気付かなかったか．

(ii) なぜ間違えたか．

(iii) 間違いを起こさないようにするためにはどうすればよいか．

まず，(i) の問題を考えてみる．上述のように，従来の証明の結果が間違っているということは容易にわかる．それならば，なぜそのような簡単なことに気付かなかったのであろうか．しかも，この証明を与えた人々の中には，パターン認識の分野では世界的な理論家として認められている人達も含まれている．ここに，研究者の心の動きが窺える．これは私の推察にすぎないが，このような証明を考えた人々の意識の底に，$\phi_n = \varphi_n$ を導こうとする気持ちが強く働いていたために，式 (14) を導出できたことで安心してしまったのではないかと思われる．このような一瞬の隙に，間違いが忍び込んでくるのである．

次に，(ii) の問題を考えてみよう．このような間違いを犯した遠因は，部分空間を求める問題を，式 (5) や式 (10) のように，その部分空間を張るような正規直交系を求める問題として定式化したところにある．確かに部分空間は，ある正規直交系を使って表現することができる．しかし，同じ部分空間を表現できる正規直交系は，無限に存在する．したがって，式 (10) の形式の変分問題を解いても，K-L 固有元という特定の正規直交系を求めることはできないのである．

(iii) 間違いを防ぐためには，その問題にふさわしい道具を使うことである．部分空間法の例でいえば，正規直交系は部分空間を構成するための手段（How）に過ぎない．今問題になっていること（What）は，最適な部分空間 S_0 がどのような空間であるかを特徴づけることである．すなわち，$S_0 = S_{\mathrm{KL}}$ を導くことである．S_0 をどのようにして構成するかということは，本来の問題とは別の問題である．How に惑わされないで，問題そのもの (What) を直接議論できるような数学的道具を使えば，従来法のような間違いが混入する余地はなくなる．前節で示した証明法でいえば，部分空間とその空間への正射影作用素とは一対一に対応している．そこで，正射影作用素 P を使えば，正規直交系を導入することなく，直接問題を定式化できるのである．式 (27) の表現がまさにその定式化になっている．How を経由しないで，問題そのもの (What) を直接議論できる数学的道具を用いて問題を定式化することが，いかに重要であるかがわかる．

繰り返しになるが，What と How の違いを，別の角度から示すことにする．パターン f の M 次元部分空間 S_0 への正射影 Pf は，

$$Pf = \sum_{n=1}^{M} \langle f, \varphi_n\rangle \varphi_n \tag{42}$$

と表すことができる．式 (42) は，2. で述べたように，f の K-L 展開と呼ばれている．一方，$\{\varphi_n\}_{n=1}^M$ を S_0 の中で任意に回転してできる正規直交系を $\{\phi_n\}_{n=1}^M$ とすれば，同じ Pf を

$$Pf = \sum_{n=1}^{M} \langle f, \phi_n\rangle \phi_n \tag{43}$$

と表すこともできる．$\{\phi_n\}_{n=1}^M$ はもはや，一般には R の固有元になっていないので，式 (43) を K-L 展開ということはない．

しかし，式 (42) と式 (43) は，同じ Pf の別表現にすぎない．パターンの近似という立場からみれば，式 (42) でも式 (43) でもよいのである．つまりこの文脈においては，K-L 展開は Pf を求めるための一つの計算手段（How）にすぎないのであって，本質を担っているもの（What）は，あくまでも f の S_0 における最良近似 Pf である．

6. おわりに

問題を定式化する際には，How（問題の解き方，計算の仕方）を紛れ込ませないで，What（何をしたいか）だけを明確にして事に当たることが肝要である．そのためには，How を経由することなく，また，問題の表面的な様相に惑わされることなく，問題の本質を直接議論できる数学的手法を用いることが大切である．

文　　献

[1] E. Oja, Subspace Methods of Pattern Recognition. Research Studies Press, Letchworth, 1983; 小川英光，佐藤誠（訳），パターン認識と部分空間法, 産業図書, 東京, 1986.

[2] P.A. Devijver and J. Kittler, Pattern Recognition: A Statistical Approach, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1982.

[3] R.O. Duda, P.E.Hart, and D.G.Stork, Pattern Classification, Second Edition, John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001.

[4] K. Fukunaga, Introduction to Statistical Pattern Recognition, Academic Press, New York, 1972.

[5] U. Grenander, Pattern Synthesis: Lectures in Pattern Theory, Springer-Verlag, Berlin, 1976.

[6] 飯島泰蔵, パターン認識, 日刊工業新聞社, 東京, 1969.

[7] 飯島泰蔵, パターン認識, コロナ社, 東京, 1973.

[8] 飯島泰蔵, パターン認識理論, 森北出版, 東京, 1989.

[9] 森俊二，坂倉栂子, パターン認識の基礎 II, オーム社, 東京, 1990.

[10] 長尾真, 画像認識論, コロナ社, 東京, 1983.

[11] 長尾真, パターン情報処理, コロナ社, 東京, 1983.

[12] 長尾真 (編), パターン認識と図形処理, 岩波書店, 東京, 1983.

[13] 中田和男 (編), パターン認識とその応用, コロナ社, 東京, 1978.

[14] 上坂吉則, パターン認識と学習の理論, 総合図書, 東京, 1971.

[15] S. Watanabe, Karhunen-Loève expansion and factor analysis, in J. Sklansky ed., Pattern Recognition, Introduction and Fundation. Dowden Hutchinson & Ross. Inc., pp.635–660, 1973

[16] 大津展之, パターン認識における特徴抽出に関する数理的研究, 電子技術総合研究所研究報告, 1981.

[17] J.P. Keating, J.E. Michalek, and J.T. Riley, A noise on the optimality of the Karhunen-Loève expansion, Pattern Recognition, vol.1, no.4, pp.203–204, 1983.

[18] H. Ogawa, "Karhunen-Loève subspace", Proc. 11th ICPR, Int. Conf. on Pattern Recognition, The Hague, The Netherlands, vol.2, pp.75–78, Aug.-Sept. 1992.

[19] H. Ogawa and E. Oja, Projection filter, Wiener filter, and Karuhunen-Loève subspaces in digital image restoration, J. Math. Anal. Appl., vol.114, no.1, pp.37–51, Feb. 1986.

[20] M.A. ナイマルク（功力，井関，笠原訳），関数解析入門　, 共立全書, 共立出版, 東京, 1968.

[21] S.L. Campbell and C.D. Meyer, Jr., Generalized Inverses of Linear Transformations, Dover Publications, Inc., New York, 1979.

[22] R. Schatten, Norm Ideals of Completely Continuous Operators. 2nd. Printing. Springer–Verlag, Berlin, 1970.

[23] 加藤敏夫, 位相解析–理論と応用への入門–, 共立出版, 東京, 1969.

[24] 戸川隼人, マトリクスの数値計算, オーム社, 東京, 1978.

[25] 伊理正夫, 一般線形代数, 岩波書店, 東京, 2003.

[26] W. ハイゼンベルク (山崎和夫訳), 科学における伝統, みすず書房, 東京, 1989.