Second-order blind source identification(SOBI) アルゴリズム

株式会社　シグナルアナリシス　関原謙介

1　データモデル

観測データがある時間間隔で次々と観測され，時系列データとして得られる状況を考える．したがって，観測データ $\boldsymbol{y}$ は時間変動するので $\boldsymbol{y}(t)$：

$$\boldsymbol{y}(t) = \begin{bmatrix} y_1(t) \\ y_2(t) \\ \vdots \\ y_M(t) \end{bmatrix}, \tag{1}$$

と表す．$\boldsymbol{y}(t)$ は離散時間点 $t = t_1, \ldots, t_K$ で観測されるとする．K は観測時間点の総数である．この観測データが

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}(t), \tag{2}$$

と表されるとする．式 (2) において，$\boldsymbol{A}$ は混合行列（mixing matrix）とよばれる．当然ながら，

$$\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y}(t)$$

も成り立ち，$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{A}^{-1}$ を分解行列（demixing matrix）と呼ぶ．ここで，$\boldsymbol{u}(t)$ は M 個の「独立成分」（independent component）からなる列ベクトルで，

$$\boldsymbol{u}(t) = \begin{bmatrix} u_1(t) \\ \vdots \\ u_M(t) \end{bmatrix}, \tag{3}$$

である．各成分 $u_1(t), \ldots, u_M(t)$ は統計的に独立であるとする．すなわち SOBI アルゴリズムは２次の統計量を用いて，観測データのタイムコース $\boldsymbol{y}(t)$（$t = t_1, \ldots, t_K$）を独立な変動 $\boldsymbol{u}(t)$（$t = t_1, \ldots, t_K$）に分解するアルゴリズムである [1, 2]．つまり，観測データ $\boldsymbol{y}(t)$（$t = t_1, \ldots, t_K$）から，$\boldsymbol{u}(t)$ の各成分が統計的に独立であるとの仮定をおき，独立成分 $\boldsymbol{u}(t)$（$t = t_1, \ldots, t_K$）と混合行列 $\boldsymbol{A}$ を推定する．

2　SOBI アルゴリズム

要素 $u_i(t)$ と $u_j(t)$ のタイムラグ τ での相関は

$$\phi_{i,j}(\tau) = \frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K} u_i(t_k)u_j(t_k+\tau) = \langle u_i(t)u_j(t+\tau)\rangle \tag{4}$$

で定義される．ここで，$\langle\cdot\rangle$ は時間平均を意味する．タイムコース $u_i(t_1),\ldots,u_i(t_K)$ と $u_j(t_1),\ldots,u_j(t_K)$ が独立であるとは

$$\phi_{i,j}(\tau) = 0, \quad \text{for all } \tau \tag{5}$$

が成り立つことである．SOBI アルゴリズムは，この条件をできるだけ満たす $u_j(t)$ を与える分解行列 $\boldsymbol{W}$（$= \boldsymbol{A}^{-1}$）を見出す．

まず，ベクトル $\boldsymbol{u}(t)$ のタイムラグ τ での相関行列を $\boldsymbol{R}_u(\tau)$ と定義する．すなわち，

$$\boldsymbol{R}_u(\tau) = \left\langle \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{u}^T(t+\tau)\right\rangle = \begin{bmatrix} \phi_{1,1}(\tau) & \phi_{1,2}(\tau) & \ldots & \phi_{1,M}(\tau) \\ \phi_{2,1}(\tau) & \phi_{2,2}(\tau) & \ldots & \phi_{2,M}(\tau) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_{M,1}(\tau) & \phi_{M,2}(\tau) & \ldots & \phi_{M,M}(\tau) \end{bmatrix} \tag{6}$$

である．$i \neq j$ の場合において，タイムコース $u_i(t_1),\ldots,u_i(t_K)$ と $u_j(t_1),\ldots,u_j(t_K)$ が独立であれば全ての τ において $\boldsymbol{R}_u(\tau)$ が対角行列になる．

データベクトル $\boldsymbol{y}(t)$ に対するタイムラグ τ での相関行列を $\boldsymbol{R}_y(\tau)$：

$$\boldsymbol{R}_y(\tau) = \left\langle \boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}^T(t+\tau)\right\rangle \tag{7}$$

と定義する．ここで，

$$\boldsymbol{R}_u(\tau) = \boldsymbol{W}\boldsymbol{R}_y(\tau)\boldsymbol{W}^T \tag{8}$$

の関係がある．SOBI アルゴリズムは複数個の $\boldsymbol{R}_y(\tau)$ を対角化する行列を見つけることで，式 (5) を満たす要素 $u_j(t)$ を与える分解行列 $\boldsymbol{W}$ を見出すアルゴリズムである．

まず，$\tau = 0$ である相関行列 $\boldsymbol{R}_y(0)$ の固有値展開を

$$\boldsymbol{R}_y(0) = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^T \tag{9}$$

と表す．$\boldsymbol{\Lambda}$ は対角成分が固有値である対角行列であり，$\boldsymbol{V}$ は固有ベクトルを列ベクトルとする直交行列である．もし，$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0$（$i \neq j$）を満たす $u_j(t)$ でデータベクトル $\boldsymbol{y}(t)$ を分解する分解行列 $\boldsymbol{W}$ を求めるなら，$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{V}^T$ とすればよい．実際，$\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y}(t)$ であるので，

$$\boldsymbol{R}_u(0) = \left\langle \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{u}^T(t)\right\rangle = \boldsymbol{V}^T\left\langle \boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}^T\right\rangle\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{R}_y(0)\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} = \boldsymbol{\Lambda} \tag{10}$$

となる．すなわち，得られた $u_j(t)$ は，$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0$（$i \neq j$）を満たす．この場合には $u_i(t)$ と $u_j(t)$ は無相関ではあっても独立ではない．

少しでも独立性の条件に近づけるため，条件を 1 つ増やし，ある τ の値 1 個を用いて

$$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0 \quad \text{および} \quad \langle u_i(t)u_j(t+\tau)\rangle = 0 \quad \text{for} \quad i \neq j \tag{11}$$

を満たす $u_j(t)$ を与える分解行列 $\boldsymbol{W}$ を求めよう．この場合には，まず，次の行列 $\boldsymbol{P}$ を

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{R}_y(0)^{-1/2} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1/2}\boldsymbol{V}^T \tag{12}$$

と定義し，これを用いてデータベクトル $\boldsymbol{y}(t)$ を

$$\boldsymbol{z}(t) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{y}(t) \tag{13}$$

と変換する．この操作は白色化 (prewhitening) と呼ばれる．白色化されたデータ $\boldsymbol{z}(t)$ に関するラグ τ の相関行列を $\boldsymbol{R}_z(\tau)$ として，$\boldsymbol{R}_z(\tau)$ の固有値展開を

$$\boldsymbol{R}_z(\tau) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{R}_y(\tau)\boldsymbol{P} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_z\boldsymbol{U}^T \tag{14}$$

と表記すれば，$\boldsymbol{\Lambda}_z$ は固有値を対角成分とする対角行列であり，$\boldsymbol{U}$ は直交行列である．そしてこれらを用いて分解行列は $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}$ と求まる．実際，

$$\boldsymbol{R}_u(0) = \left\langle \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{u}^T(t)\right\rangle = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}\left\langle \boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}^T(t)\right\rangle \boldsymbol{P}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}\boldsymbol{R}_y(0)\boldsymbol{P}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{I}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I} \tag{15}$$

であるので，$i \neq j$ に対して，まず，$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0$ は成立する．次に，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_u(\tau) = \left\langle \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{u}^T(t+\tau)\right\rangle &= \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}\left\langle \boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}^T(t+\tau)\right\rangle \boldsymbol{P}\boldsymbol{U} \\ &= \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}\boldsymbol{R}_y(\tau)\boldsymbol{P}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{R}_z(\tau)\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_z\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Lambda}_z\end{aligned} \tag{16}$$

が成り立つため，$i \neq j$ に対して，$\langle u_i(t)u_j(t+\tau)\rangle = 0$ も成立する．すなわち，ここで求まった $u_j(t)$ は単に無相関（$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0$）であるのみでなく，ある 1 つの τ において，$\langle u_i(t)u_j(t+\tau)\rangle = 0$ を満たし，独立な信号に近づいたものとなっている．

さらに独立性の条件に近づけるため，複数個のタイムラグを用いて，

$$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0 \quad \text{および} \quad \langle u_i(t)u_j(t+\tau_\ell)\rangle = 0 \quad \text{for} \quad i \neq j \quad \ell = 1,\dots,L \tag{17}$$

を満たす $u_j(t)$ を与える分解行列 $\boldsymbol{W}$ を求める[1]．τ が 1 個の場合と同様に，まず，白色化を行う．行列 $\boldsymbol{P}$ を式 (12) で定義し，これを用いてデータベクトル $\boldsymbol{y}(t)$ を

$$\boldsymbol{z}(t) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{y}(t) \tag{18}$$

と変換する．$\boldsymbol{z}(t)$ に関するラグ τ_1 から τ_L までの相関行列を $\boldsymbol{R}_z(\tau_\ell)$（$\ell = 1,\dots,L$）として，$\boldsymbol{R}_z(\tau_\ell)$ を対角化する共通の直交行列 $\boldsymbol{U}$ を求める．このような $\boldsymbol{U}$ は存在し，文献 [4] に述べられている方法 (joint diagonalization と呼ばれる) により求めることができる．このような $\boldsymbol{U}$ を用いて，

$$\boldsymbol{R}_z(\tau_1) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{R}_y(\tau_1)\boldsymbol{P} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_z^{(1)}\boldsymbol{U}^T \tag{19}$$

$$\vdots \tag{20}$$

$$\boldsymbol{R}_z(\tau_L) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{R}_y(\tau_L)\boldsymbol{P} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_z^{(L)}\boldsymbol{U}^T \tag{21}$$

[1] τ が 2 個以上の SOBI アルゴリズムは TDZEP(temporal decorrelation source separation) と呼ばれる場合がある [3].

と τ_1 から τ_L までのラグを持つ相関行列を対角化できる．ここで，$\boldsymbol{\Lambda}_z^{(\ell)}$ は対角行列であり，$\boldsymbol{U}$ は直交行列である．したがって，分解行列はやはり $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}$ と求まる．実際，式 (15) と全く同様に $i \neq j$ に対して，$\langle u_i(t)u_j(t)\rangle = 0$ は成立する．次に，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_u(\tau_\ell) = \left\langle \boldsymbol{u}(t)\boldsymbol{u}^T(t+\tau_\ell)\right\rangle &= \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}\left\langle \boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}^T(t+\tau_\ell)\right\rangle \boldsymbol{P}\boldsymbol{U} \\ &= \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}\boldsymbol{R}_y(\tau_\ell)\boldsymbol{P}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{R}_z(\tau_\ell)\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_z^{(\ell)}\boldsymbol{U}^T\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Lambda}_z^{(\ell)}\end{aligned} \tag{22}$$

が成り立つため，$i \neq j$ に対して，$\langle u_i(t)u_j(t+\tau_\ell)\rangle = 0$ が $\ell = 1, \ldots, L$ に対して成立する．したがって，ここで求まった成分 $u_j(t)$ は独立性の性質を強く満たすものである．

3 まとめ

SOBI アルゴリズムを用いたアーチファクトの除去は次の手順で行う．

1. データ $\boldsymbol{y}(t)$ に対するラグゼロの相関行列 $\boldsymbol{R}_y(0)$ を求め，この行列の固有値展開から白色化を行う行列 $\boldsymbol{P}$ を求める．
2. 複数個のラグにおいて相関行列 $\boldsymbol{R}(\tau_\ell)$（$\ell = 1, \ldots, L$）を求め，これを共通対角化 (joint diagonalization) することにより対角化直交行列 $\boldsymbol{U}$ を求める．
3. 分解行列（demixing）行列 $\boldsymbol{W}$ を $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{U}^T\boldsymbol{P}$ から求め，さらに，独立成分 $\boldsymbol{u}(t)$ を $\boldsymbol{u}(t) = \boldsymbol{W}\boldsymbol{y}(t)$ から求める．
4. タイムコース $u_j(t_1), \ldots, u_j(t_K)$（$j = 1, \ldots, M$）を調べ，アーチファクトと思われる成分はゼロと置き換える．
5. アーチファクト成分をゼロと置き換えた成分ベクトルを $\widetilde{\boldsymbol{u}}(t)$ とすれば，アーチファクト除去後のデータベクトル $\widetilde{\boldsymbol{y}}(t)$ を $\widetilde{\boldsymbol{y}}(t) = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{U}\widetilde{\boldsymbol{u}}(t)$ から再構成する．

参考文献

[1] L. Molgedey and H. G. Schuster, “Separation of a mixture of independent signals using time delayed correlations,” *Phys. Rev. Let.*, vol. 45, pp. 434–44, 1997.

[2] A. Belouchrani, K. A.-Meraim, J.-F. Cardoso, and E. Moulines, “A blind source separation technique using second-order statistics,” *IEEE Trans. Signal Process.*, vol. 45, pp. 434–44, 1997.

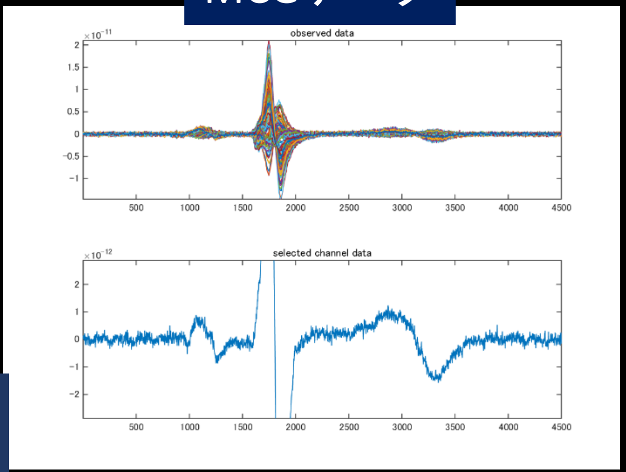
[3] A. Ziehe and K.-R. Müller, “Tdsep: an efficient algorithm for blind separation using time structure,” in *ICANN 98*, pp. 675–680, Springer, 1998.

[4] J.-F. Cardoso and A. Souloumiac, “Jacobi angles for simultaneous diagonalization,” *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, vol. 17, pp. 161–164, 1996.

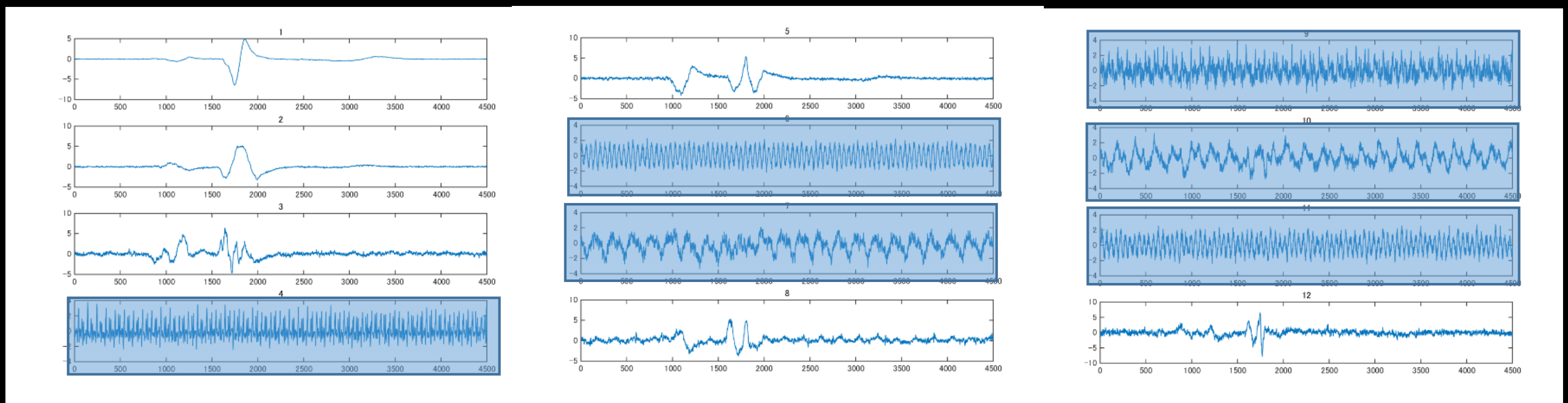
東京医科歯科大学におけるMCGデータから冷凍機の振動ノイズ除去実験

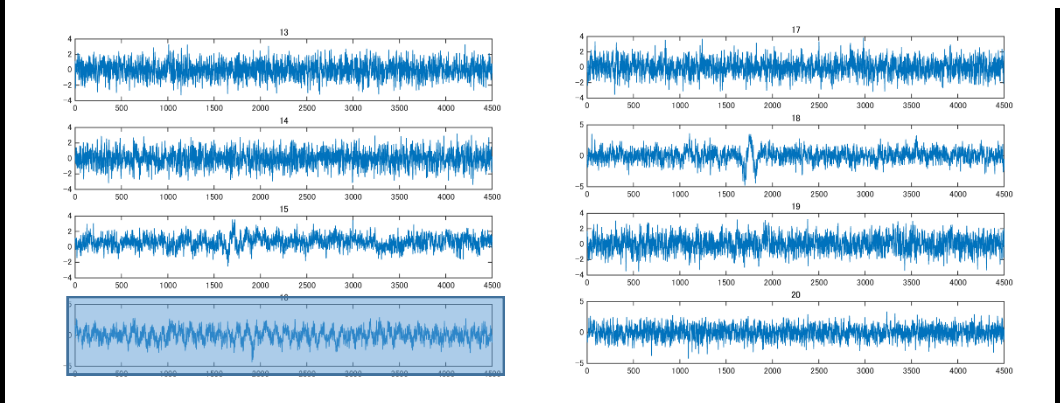
SVDによりdimension reduction:
120センサーデータ ➡ 20タームコースデータ

MCGデータ

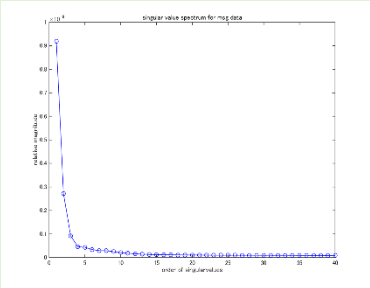


ICA アルゴリズムにより得られた20個のコンポーネント
（青いウィンドウで囲った成分を振動のイズ成分と推定）

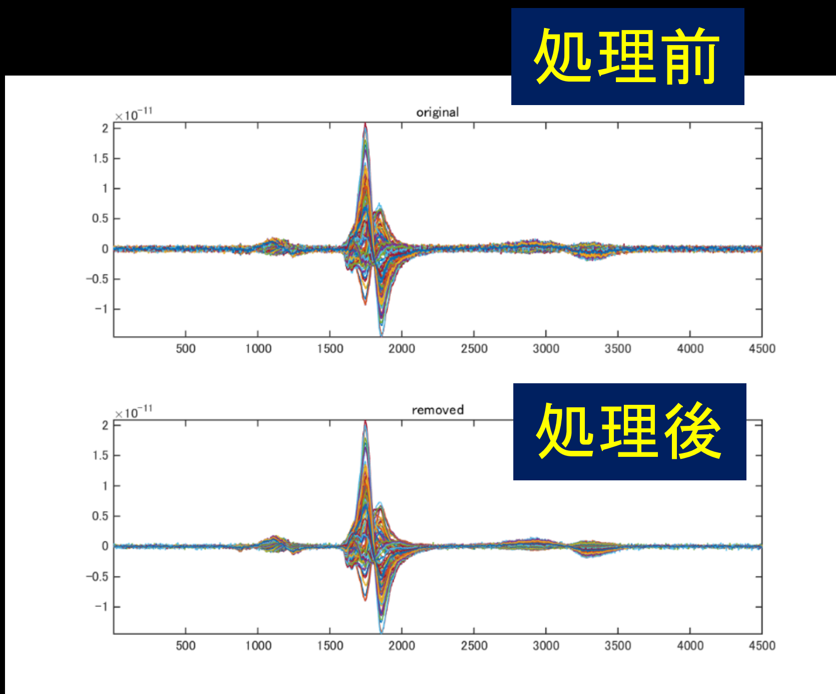




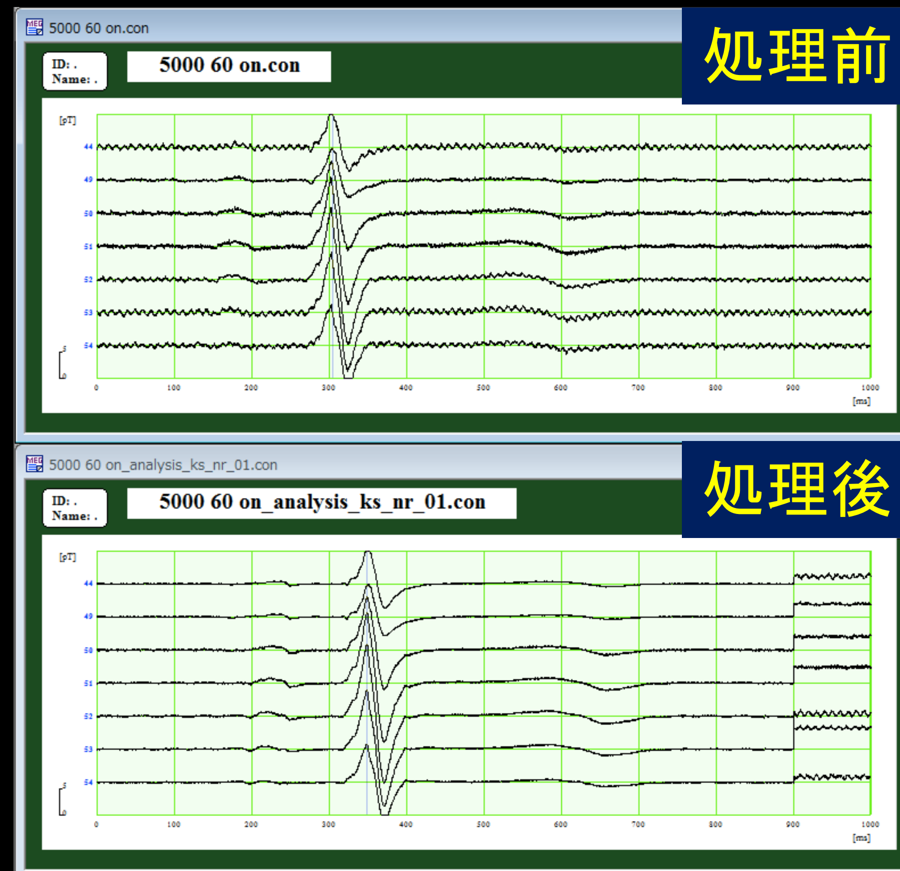
特異値スペクトル



実験結果


処理前
original
処理後
removed

波形拡大表示


5000 60 on.con
処理前
5000 60 on_analysis_ks_nr_01.con
処理後