



研究・技術ノート

特異スペクトル解析法を用いた揺動成分の分離

Separation of Fluctuation Component with Singular Spectrum Analysis

坂東隆宏^{*,†}, 大館 暁¹⁾BANDO Takahiro^{*,†} and OHDACHI Satoshi¹⁾総合研究大学院大学, ¹⁾核融合科学研究所

(原稿受付: 2020年2月3日 / 原稿受理: 2020年3月11日)

実験データの解析においては時系列データからトレンド成分と揺動成分を分離し解析する必要性に出くわすことがある。分離手法として広く用いられているものとしては Fourier 変換があげられる。Fourier 変換を用いる場合には、任意の時系列データが異なる振幅・周波数・位相を持つ正弦波の無限和によって表現できることを利用し、注目する周波数成分のみ分離する。一方で、Fourier 変換は定常信号の解析に有効であり、非定常信号には用いることができない。本稿では、非定常信号に適用でき、かつ、基底をあらかじめ指定しない特異スペクトル解析法 (Singular Spectrum Analysis) を用いた揺動成分の分離手法を紹介する。特異スペクトル解析法では、1次元の時系列データを1対1写像を用いて行列に変換し、その行列に対して特異値分解 (Singular Value Decomposition) を行う。あらかじめ基底を指定しないので、データ点が少ない場合などでも揺動成分の分離を柔軟に行うことができる。

Keywords:

Singular Spectrum Analysis (SSA), Singular Value Decomposition (SVD), signal processing, experimental data, separation of fluctuation component, noise reduction

1. はじめに

実験データの解析においては時系列データからトレンド成分と揺動成分を分離し解析する必要性に出くわすことがある。分離手法として広く用いられているものとしては Fourier 変換があげられる。Fourier 変換を用いる場合には、任意の時系列データが異なる振幅・周波数・位相を持つ正弦波の無限和によって表現できることを利用し、注目する周波数成分のみ分離する。一方で、Fourier 変換は定常信号の解析に有効であり、非定常信号には用いることができない。非定常信号に適用可能な手法としては、Fourier 変換と同様に基底を元に分解する離散 Wavelet 変換を用いた多重解像度解析があげられる。

本稿では、非定常信号に適用でき、かつ、基底をあらかじめ指定しない特異スペクトル解析法 (Singular Spectrum Analysis) を用いた揺動成分の分離手法を紹介する。特異スペクトル解析法では、1次元の時系列データを1対1写像を用いて行列に変換し、その行列に対して特異値分解 (Singular Value Decomposition) を行う。あらかじめ基底を指定しないので、データ点が少ない場合などでも揺動成分の分離を柔軟に行うことができる。一方で、特異値分解を行うため、長大なデータ列を計算機で処理すると膨大な計算コストがかかる点には注意が必要である。

プラズマ・核融合分野での実験データ解析への特異スペクトル解析法の適応例は少ない (たとえば[1]) もの、

大型ヘリカル装置 LHD において水素ベレット入射直後の軟 X 線信号に観測された Snake-like 構造[2]や、Helically-trapped-energetic-ion driven resistive interchange mode (EIC) 励起時に観測された電子温度の揺動成分にみられる Tearing parity を持つモード構造[3]の解析においては、特異スペクトル解析法の有用性が示されている。他の分野における活用例については文献[4]などを御覧いただきたい。

本稿の第2節では、特異スペクトル解析法の具体的な手順について述べる。第3節において、テスト信号およびプラズマ実験で得られた軟 X 線信号に対する特異スペクトル解析法の適用例を示す。第4節でまとめを述べると共に関連する文献を紹介する。

2. 特異スペクトル解析法

特異スペクトル解析法では、時系列データの部分時系列からなる Trajectory matrix を構成し、その Trajectory matrix に特異値分解を適用することで時系列データを分解する。ここではまず特異値分解の性質を述べた後に、特異スペクトル解析法を用いた分離手法の詳細について述べる。

2.1 特異値分解

特異値分解とは行列に対する次の分解 (式1) のことを言う。すなわち、任意の $m \times n$ 実行列 A は適当な m 次実直交行列 U および n 次実直交行列 V を取れば、

* 現所属は量子科学技術研究開発機構那珂核融合研究所

† ORCID ID : 0000-0003-1493-9185

corresponding author's e-mail: bando.takahiro@qst.go.jp

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^T \quad (1)$$

の形に分解できる。 $\mathbf{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots)$ に含まれる $\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_r\}$ を $\mathbf{A}$ の特異値と呼ぶ。ここで $r = \text{rank}(\mathbf{A})$ である。 $\mathbf{U} = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_m]$, $\mathbf{V} = [\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n]$ とすれば、

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sigma_1 \mathbf{u}_1 \mathbf{v}_1^T + \sigma_2 \mathbf{u}_2 \mathbf{v}_2^T + \dots + \sigma_r \mathbf{u}_r \mathbf{v}_r^T = \mathbf{A}_1 + \mathbf{A}_2 + \dots + \mathbf{A}_r, \\ \mathbf{A}_i &= \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \end{aligned} \quad (2)$$

と展開できる。ここで、 $\{\mathbf{u}_i\}$ および $\{\mathbf{v}_i\}$ は正規直交基底とできる。

特異値分解は行列に対する「自然な」¹ノルムである Frobenius ノルム

$$\|\mathbf{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{i,j}^2} \quad (3)$$

と密接な関係がある。すなわち、

$$\|\mathbf{A}\|_F^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 \quad (4)$$

$$\|\mathbf{A}_i\|_F^2 = \sigma_i^2 \quad (5)$$

という関係がある。したがって、

$$\|\mathbf{A}_i\|_F^2 / \|\mathbf{A}\|_F^2 = \sigma_i^2 / \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 \quad (6)$$

となり、 $\mathbf{A}_i$ の $\mathbf{A}$ に対する寄与の大きさが σ_i の大きさによって評価できることがわかる。式(4)の証明は文献[5]などを参照いただきたい。式(5)の証明は本稿の付録1に記した。

2.2 特異スペクトル解析法による主要項と非主要項の分離の手続き

まず、分解したい時系列データを $\mathbb{X}_N = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_N)$ と置く。ここで、Lagged vector を次のように定義する。

$$\mathbf{g}_i = (x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+L-1})^T \quad (1 \leq i \leq K) \quad (7)$$

ここで、 $1 < L < N$, $K = N - L + 1$ である。このLagged vector を用いて Trajectory matrix $\mathbf{X}$ を次のように定義する。

$$\mathbf{X} = [\mathbf{g}_1, \mathbf{g}_2, \dots, \mathbf{g}_K] = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 & x_3 & \dots & x_K \\ x_2 & x_3 & x_4 & \dots & x_{K+1} \\ x_3 & x_4 & x_5 & \dots & x_{K+2} \\ \dots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_L & x_{L+1} & x_{L+2} & \dots & x_N \end{pmatrix} \quad (8)$$

Trajectory matrix はHankel行列となっていることに注意する。Hankel行列とは、行列要素 $a_{i,j}$ が別の行列要素 $a_{k,l}$ と次の関係にある任意の行列 $\mathbf{A}$ のことを言う。

$$a_{i,j} = a_{k,l} \quad (i+j = k+l) \quad (9)$$

ある L が定まると、 $\mathbb{X}_N$ からHankel行列である Trajectory matrix $\mathbf{X}$ への変換は一对一線形写像となる。したがって、もし $\mathbf{X}$ がいくつかのHankel行列に分解できるなら、それは $\mathbb{X}_N$ がいくつかの時系列データに分解できることを意

味する。Hankel 行列への理解を深めるため、Trajectory matrix の具体的な様子を付録2に示した。

次に、Trajectory matrix $\mathbf{X}$ を特異値分解を用いて

$$\mathbf{X} = \mathbf{X}_1 + \mathbf{X}_2 + \dots + \mathbf{X}_r \quad (10)$$

$$\mathbf{X}_i = \sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T \quad (11)$$

と展開する。 $r = \text{rank}(\mathbf{X})$ である。ここで、集合 $\{1, 2, 3, \dots, r\}$ から任意の j 個の整数を取り出して集合 $I = \{i_1, i_2, \dots, i_j\}$ を作り、

$$\mathbf{X}_I = \mathbf{X}_{i_1} + \mathbf{X}_{i_2} + \dots + \mathbf{X}_{i_j} \quad (12)$$

を構成することを考える。 $\mathbf{X}_I$ がHankel行列であれば、ここから新たな時系列データ $\mathbb{X}_I$ を構成することができる。

しかしながら、一般に $\mathbf{X}_I$ や $\{\mathbf{X}_{i_j}\}$ はHankel行列ではない。 $L \times K$ 行列 $\mathbf{X}_I$ から長さ N の時系列データを再構成するためには、 $\mathbf{X}_I$ をHankel行列に変換する必要があるため、 $\mathbf{X}_I$ をHankel行列に変換する演算子 $\mathcal{H}$ をここで次のように定義する。 $\tilde{\mathbf{Y}} = \mathcal{H} \mathbf{Y}$ とし、 $\tilde{\mathbf{Y}}$ および $\mathbf{Y}$ それぞれの成分を $\tilde{y}_{i,j}$, $y_{i,j}$ とし、

$$\tilde{y}_{i,j} = \sum_{(k,l) \in A_s} y_{k,l} / |A_s| \quad (13)$$

$$A_s = \{(k, l) : k + l = i + j = s\}$$

である。 $|A_s|$ は集合 A_s の元の個数である。この $\tilde{\mathbf{Y}}$ はHankel行列であり、 $\|\mathbf{H} - \mathbf{Y}\|_F$ を最小化するHankel行列 $\mathbf{H}$ である。この証明は本稿の付録3に記す。なお、演算子 $\mathcal{H}$ は線形写像であるので、式(12)で $\mathcal{H}$ を $\mathbf{X}_I$ に作用させることは、 $\mathcal{H}$ を個々の $\mathbf{X}_{i_j}$ に作用させて総和を取ることと同値である。 $\tilde{\mathbf{X}}_I = \mathcal{H} \mathbf{X}_I$ なるHankel行列化した $\tilde{\mathbf{X}}_I$ を用いれば、新たな時系列データ $\mathbb{X}_I$ を構成することができる。

さて、先に述べたとおり Frobenius ノルムに関して

$$\|\mathbf{X}\|_F^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2 \quad \text{and} \quad \sigma_i^2 = \|\mathbf{X}_i\|_F^2 \quad (14)$$

が成り立つ。したがって、 σ_i は各Elementary matrix $\mathbf{X}_i$ が $\mathbf{X}$ にどれだけ寄与するかを示す指標となる。主要な σ_i に対応する $\mathbf{X}_i$ だけ選び、そこから新たな時系列データを構成することで、主要項と非主要項を分離することができる。本稿では主要項をトレンド成分とし非主要項を揺動成分として時系列データを分解する。

以上の手続きの中で、 $\mathbb{X}_N$ に対するLagged vectorの長さ L には任意性があるのがわかる。 L によってTrajectory matrix が変化し、したがって、特異値分解で得られるElementary matrix が変化する。 L は分離したい成分に合わせて選択する必要がある。ある周波数を持つ揺動成分については、分離したい揺動成分を含むデータ長以上を設定することが文献[6]では推奨されており、筆者の経験からもそのように設定するのが適切だと考える。

また、時系列データに、ある程度大きい振幅を持つ揺動成分が二つ以上含まれている場合は、これらの揺動成分を分離できるかどうか実際の解析では問題になりうるだろ

1 $m \times n$ 行列 $\mathbf{A}$ の各成分を $(m \times n)$ 次元ベクトル $\mathbf{a}$ に展開した時、 $\|\mathbf{A}\|_F$ と $\mathbf{a}$ のユークリッドノルムは等しく、この意味で「自然な」ノルムと考えられる。

う。こういった分離の問題は、特異スペクトル解析法では「Separability」として議論される。いま興味があるのは、二つの正弦波 $A_1 \sin(\omega_1 t + \phi_1)$ および $A_2 \sin(\omega_2 t + \phi_2)$ が分離できるかどうかである。ここで、変数 t は時刻でありそれ以外の変数は定数である。文献[6]では、 $\omega_1 \neq \omega_2$ かつ $A_1 \neq A_2$ であれば、時系列データのデータ長 N および Lagged vector の長さ L を十分に長くとることで、これら二つの正弦波を分離できることが示唆されている。Separability について詳しくは、文献[6]の2.3節、文献[7]の1.5節および6.1節にて解説されている。

3. テスト信号および実験データへの適用例

3.1 テスト信号への適用例

テスト信号に対する特異スペクトル解析法の適用例を2例示す。

例1. $y = \sin(2\pi f t)$

$y = \sin(2\pi f t)$ の正弦波に対して $f = 0.25$ とする。この関数の値を $0 \leq t \leq 30$ の区間に $n = 100$ の点数で等間隔に与え時系列データ $\mathbb{X}_N$ を作る。この時系列データに対して $L = 50$ として、特異スペクトル解析法を適用する。図1に(a)作成したテスト信号、(b)1番目・2番目の大きさを持つ特異値を用いて再構成した信号、(c)全特異値を用いて再構成した信号を示す。対応する特異値は図1(d)に示した。この例では、1番目と2番目の主要な特異値で元の時系列データが再現されていることがわかる。1番目と2番目の特異値が同等の大きさになっているが、これは特異スペクトル解析法の特性である。すなわち、ある正弦波は同じ程度の寄与を持つ2つの Elementary matrix に分解される[6]。

例2. $y = a \sin(2\pi f t^b) \exp(-c t) + d t^e + \text{noise}$

$y = a \sin(2\pi f t^b) \exp(-c t) + d t^e + \text{noise}$ という関数に対して、 $f = 1$, $a = 20$, $b = 0.8$, $c = 0.08$, $d = 0.1$, $e = 1.8$ とする。この関数の値を $0 \leq t \leq 30$ の区間に $n = 150$ の点数で等間隔に与え時系列データ $\mathbb{X}_N$ を作る。この時系列データに対して $L = 28$ として、特異スペクトル解析法を適用する。このテスト信号のうち、 $a \sin(2\pi f t^b) \exp(-c t)$ は振幅・周波数が時間的に変化する正弦波であり、 $d t^e$ は時間的に増加するトレンドで

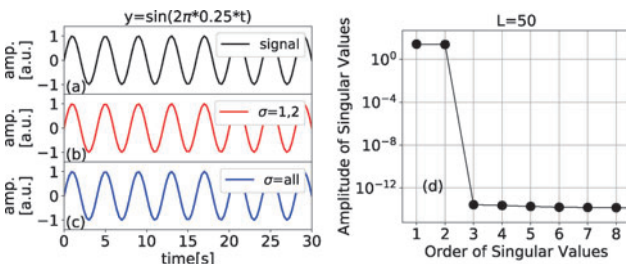


図1 (a)テスト信号、(b)1番目・2番目の大きさを持つ特異値を用いて再構成した信号、(c)全特異値を用いて再構成した信号。(d) $L = 50$ とした時のテスト信号に対する特異値を大きい順に8つ示した。

ある。図2に(a)生成したテスト信号、(b)テスト信号を構成する各項の成分を示した。このような時系列データに対しては、Fourier変換によって揺動成分のみ取り出すことが難しい。図3に(a)計算された特異値、(b)1番目の大きさを持つ成分を用いて再構成した信号、(c)2～5番目の大きさを持つ成分を用いて再構成した信号を示した。図3(b)ではトレンド成分が、図3(c)では揺動成分が得られていることがわかる。この再構成結果からわかる通り、特異スペクトル解析法はノイズ除去にも適用できる。

3.2 実験データへの適用例

LHDのプラズマ実験で得られた軟X線信号に特異スペクトル解析法を適用し、揺動成分を分離した例を示す。図4(a)にプラズマに水素ペレットを入射した直後の軟X線信号を示した。この軟X線信号には、電子温度の回復による緩やかに増加するトレンド成分と振幅が時間的に変わる揺動成分の2成分がある。この時間的に変化する振幅はSnake-like構造[2]をなす成分である。Snake-like構造の空間的な構造を研究するためには、トレンド成分と揺動成分

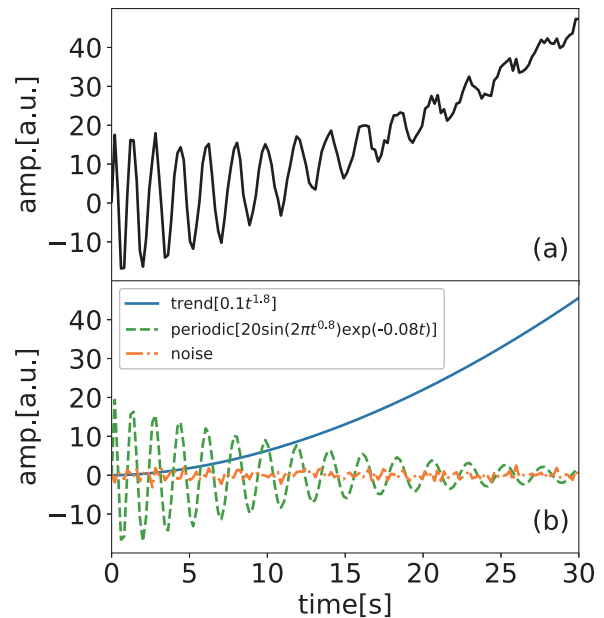


図2 (a)生成したテスト信号、(b)テスト信号を構成する各項の成分。

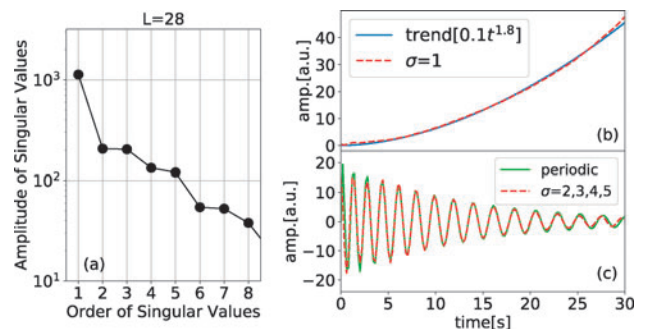


図3 (a) $L = 28$ とした時のテスト信号(例2)に対する特異値を大きい順に8つ示した。(b)1番目の大きさを持つ特異値を用いて再構成した信号、(c)2～5番目の大きさを持つ特異値を用いて再構成した信号。(b)、(c)には、比較のためにテスト信号を構成する成分(trend, periodic)を示した。

を分離する必要がある。

図4(b), (c)に特異スペクトル解析法または Fourier 変換によるバンドパスフィルタを用いて揺動成分の取り出しを試みた例を示す。図4(c)では、観測された揺動成分の周波数は600 Hz~700 Hzであるので、400 Hz~900 Hzのバンドパスフィルタを軟 X 線信号に適用した。バンドパスフィルタを行う際には、時間方向の窓関数として、始端付近の揺動成分の変化を抑えるため方形波を用いている。特異スペクトル解析法を適用した図4(b)の場合では上手く揺動成分のみを取り出せているが、バンドパスフィルタを適用した図4(c)の場合では、Gibbs 現象と思われる振動が発生しており時系列データの始端と終端における揺動成分の取得に失敗していることがわかる。

4. まとめ

本稿では、特異スペクトル解析法を用いたトレンド成分と揺動成分の分離方法およびその適用例について述べた。特異スペクトル解析法を用いることで、周波数・振幅が時間的に変動している揺動と、緩やかに変動しているトレンド成分とを分離することができる。Fourier変換やWavelet変換と異なり、特異スペクトル解析法は決まった基底を用いないので様々な信号に対して柔軟な分解を行うことができる。一方で、特異値分解を行うため、長大なデータ列を処理すると膨大な計算コストがかかる点には注意が必要である。テスト信号および実験的に得られた軟 X 線信号に特異スペクトル解析法を用いることで、緩やかに変動するトレンド成分と振幅・周波数が時間的に変動する揺動成分とを分離可能であることを示した。

このように特異スペクトル解析法は柔軟に分離を行うことができるが、実際のところ、Fourier 変換・Wavelet 変換で事足りてしまうことが多い。しかしながら、Fourier 変換・Wavelet 変換で対応できないような例（たとえば、利用できるデータ点が少なく、トレンドが緩やかに変化し、揺動成分の振幅・周波数が時間的に変動する場合[2, 3]）では特異スペクトル解析法は有効に働く。

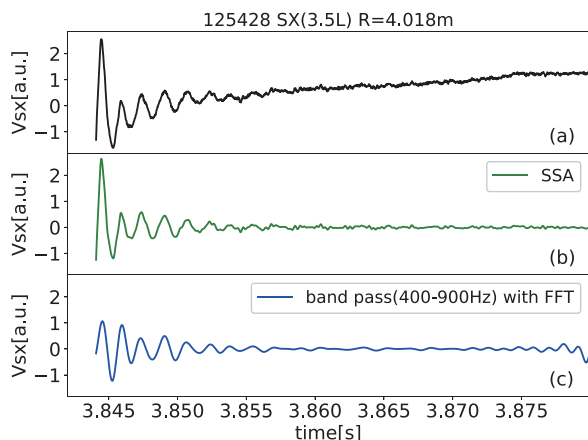


図4 軟 X 線信号への特異スペクトル解析法・Fourier 変換 (FFT) の適用例。(a)水素ベレット入射直後の軟 X 線信号。(b)軟 X 線信号に特異スペクトル解析法を適用し揺動成分の取得を試みたもの。(c)軟 X 線信号に Fourier 変換によるバンドパスフィルタを適用し揺動成分の取得を試みたもの。

最後に関連する文献を紹介する。まず、Fourier 変換、Wavelet 変換に対してはいくつも教科書があるが、Wavelet 変換については[8]が網羅的で詳しい。本学会誌においても過去に[9, 10]などの解説がある。特異スペクトル解析法を用いたトレンド成分と揺動成分の分離に関し、日本語で読める教科書的な説明は[11]にある。より詳しい文献としては[6, 7, 12]があげられる。特異値分解のコンパクトで教科書的な説明は[5, 13]にある。特異値分解は多次元データに対しても利用でき、画像データに対する特異値分解を用いた揺動成分の分離手法が本学会誌にて解説されている[14]。特異スペクトル解析法は、1次元データを Trajectory matrix に変換して特異値分解を適用するという点で、多次元データに対する特異値分解を1次元データに適用した例とみることもできよう。

謝 辞

本稿は筆者(坂東 隆宏)の博士論文[15]の第5章の一部を修正、加筆したものである。博士論文を審査いただいた稲垣 滋博士、榊原 悟博士、武智 学博士、藤堂 泰博士に感謝いたします。また、本稿の内容の一部は核融合科学研究所の一般共同研究 NIFS07KLPH004 による支援を受けたものです。

参考文献

- [1] L. Marrelli *et al.*, Rev. Scientific Instrum. **72**, 499 (2001).
- [2] T. Bando *et al.*, Phys. Plasmas **25**, 012507 (2018).
- [3] T. Bando *et al.*, Nucl. Fusion **58**, 082025 (2018).
- [4] A. Zhigljavsky, Statistics and Its Interface Volume 3, 255 (2010).
- [5] 金谷健一：線形代数セミナー：射影、特異値分解、一般逆行列 (共立出版, 2018)。
- [6] N. Golyandina and A. Zhigljavsky, *Singular Spectrum Analysis for Time Series* (Springer, 2013).
- [7] N. Golyandina *et al.*, *Analysis of Time Series Structure: SSA and Related Techniques* (Chapman and Hall/CRC, 2001).
- [8] 新 誠一, 中野和司：図説ウェーブレット変換ハンド

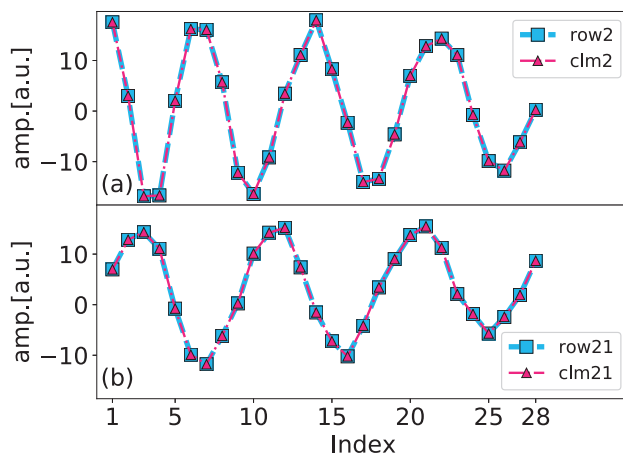


図5 (a)Trajectory matrixの第2行(row2)および第2列(clm2)の成分。(b)Trajectory matrixの第21行(row21)および第21列(clm21)の成分。

ブック (朝倉書店, 2005).

- [9] 辻 義之 他: プラズマ・核融合学会誌 85, 620 (2009).
 [10] 犬塚 博: プラズマ・核融合学会誌 74, 1023 (1998).
 [11] 馬杉正男: 信号解析-信号処理とデータ分析の基礎- (森北出版, 2013).
 [12] H. Hassani, J. Data Science 5, 239 (2007).
 [13] 池辺八洲彦 他: 現代線形代数-分解定理を中心として- (共立出版, 2009).
 [14] 西野信博, 大館 暁: プラズマ・核融合学会誌 86, 648 (2010).
 [15] 坂東隆宏: 「LHDにおける重水素プラズマのMHD不安定性に関する実験研究」総研大物理科学研究科博士論文, 2018年3月. (総合研究大学院大学学術情報リポジトリのWebサイトよりダウンロード可能).

付録. 1 $\|A_i\|_F^2 = \sigma_i^2$ の証明

A を $m \times n$ 実行列とする. A_i の定義と Frobenius ノルムの定義から

$$\|A_i\|_F^2 = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n (\sigma_i \mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T)_{k,l}^2 = \sigma_i^2 \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n (\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T)_{k,l}^2 \quad (15)$$

である. さて,

$$A_i = \sigma_i \begin{pmatrix} (\mathbf{u}_i)_1(\mathbf{v}_i)_1 & (\mathbf{u}_i)_1(\mathbf{v}_i)_2 & (\mathbf{u}_i)_1(\mathbf{v}_i)_3 & \cdots & (\mathbf{u}_i)_1(\mathbf{v}_i)_n \\ (\mathbf{u}_i)_2(\mathbf{v}_i)_1 & (\mathbf{u}_i)_2(\mathbf{v}_i)_2 & (\mathbf{u}_i)_2(\mathbf{v}_i)_3 & \cdots & (\mathbf{u}_i)_2(\mathbf{v}_i)_n \\ (\mathbf{u}_i)_3(\mathbf{v}_i)_1 & (\mathbf{u}_i)_3(\mathbf{v}_i)_2 & (\mathbf{u}_i)_3(\mathbf{v}_i)_3 & \cdots & (\mathbf{u}_i)_3(\mathbf{v}_i)_n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\mathbf{u}_i)_m(\mathbf{v}_i)_1 & (\mathbf{u}_i)_m(\mathbf{v}_i)_2 & (\mathbf{u}_i)_m(\mathbf{v}_i)_3 & \cdots & (\mathbf{u}_i)_m(\mathbf{v}_i)_n \end{pmatrix} \quad (16)$$

であるので,

$$\sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n (\mathbf{u}_i \mathbf{v}_i^T)_{k,l}^2 = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n (\mathbf{u}_i)_k^2 (\mathbf{v}_i)_l^2 \quad (17)$$

とできる. ここで, U と V の各列は正規化されたベクトルなので,

$$\sum_{k=1}^m (\mathbf{u}_i)_k^2 = 1 \quad \text{and} \quad \sum_{l=1}^n (\mathbf{v}_i)_l^2 = 1 \quad (18)$$

であることを用いると式(17)は,

$$\sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n (\mathbf{u}_i)_k^2 (\mathbf{v}_i)_l^2 = 1 \quad (19)$$

となる. この結果と式(15)から, 求める関係式

$$\|A_i\|_F^2 = \sigma_i^2 \quad (20)$$

が示された.

付録. 2 Hankel 行列である Trajectory matrix の具体的な様子

Hankel 行列である Trajectory matrix の具体的な様子を本稿3.1節の例2で作成する Trajectory matrix の場合で示す.

図5では, (a) Trajectory matrix の第2行および第2列の成分, (b) Trajectory matrix の第21行および第21列の成分を示した. $L \times K$ 行列 X およびその行列要素 $x_{i,j}$ について, $C = \min(L, K)$ とした時, 図5(a)では $(x_{2,1}, x_{2,2}, x_{2,3}, \dots, x_{2,C})$, $(x_{1,2}, x_{2,2}, x_{3,2}, \dots, x_{C,2})$ を順に示し, 図5(b)では $(x_{21,1}, x_{21,2}, x_{21,3}, \dots, x_{21,C})$, $(x_{1,21}, x_{2,21}, x_{3,21}, \dots, x_{C,21})$ を順に示している. 図5(a), (b)それぞれで, 行と列は同じデータ列であることがわかるが, これは Trajectory matrix が Hankel 行列であり $x_{i,j} = x_{k,l}$ ($i+j = k+l$) が満たされているためである.

付録. 3 行列 X に対し $\|H-X\|_F$ を最小とする Hankel 行列 H の導出

X を $m \times n$ 実行列とする. ここでは Hankel 行列 H の中で $\|H-X\|_F$ を最小とする H を求める. $\|H-X\|_F$ は常に正なので, この問題は $\|H-X\|_F^2$ を最小とする H を求める問題と同値である. 以降, H と X の成分をそれぞれ $h_{i,j}$, $x_{i,j}$ と書く. ここで,

$$G = \|H-X\|_F^2 = \sum_{k=1}^m \sum_{l=1}^n (h_{k,l} - x_{k,l})^2 \quad (21)$$

とする. 求める H は, G の最小値を与える $h_{i,j}$ ($1 \leq i \leq m, 1 \leq j \leq n$) を求めることで得られる.

さて, 同じ $s = i+j$ をとる $h_{i,j}$ を含む項をまとめると,

$$G = \sum_s G_s \quad (22)$$

$$G_s(h_{i,j}) = \sum_{(k,l) \in A_s} (h_{k,l} - x_{k,l})^2 = \sum_{(k,l) \in A_s} (h_{i,j} - x_{k,l})^2 \quad (23)$$

$$A_s = \{(k, l) : k+l = i+j = s\}$$

と書ける². 各々の $G_s(h_{i,j})$ を最小とする $h_{i,j}$ ($i+j=s$) を求めることで, G を最小とする H が得られる.

そこで,

$$\frac{dG_s}{dh_{i,j}} = \frac{d}{dh_{i,j}} \left\{ \sum_{(k,l) \in A_s} (h_{i,j} - x_{k,l})^2 \right\} = 0 \quad (24)$$

を満たす $h_{i,j}$ ($i+j=s$) を求める. $G_s(h_{i,j})$ は下に凸の関数であるので, 式(24)で得られる $h_{i,j}$ により G_s の最小値が得られる. 計算を進めると,

$$\frac{d}{dh_{i,j}} \left\{ \sum_{(k,l) \in A_s} (h_{i,j} - x_{k,l})^2 \right\} = 2 \left\{ |A_s| h_{i,j} - \sum_{(k,l) \in A_s} x_{k,l} \right\} = 0 \quad (25)$$

となる. ここで $|A_s|$ は集合 A_s の元の個数である. ゆえに,

$$h_{i,j} = \frac{1}{|A_s|} \sum_{(k,l) \in A_s} x_{k,l} \quad (26)$$

が一意に得られる. 式(26)で求めた $h_{i,j}$ を成分として持つ H により G は最小となる.

² H は Hankel 行列であるので, $h_{i,j} = h_{k,l}$ ($i+j = k+l$) であることに注意されたい.