カーネル多変量解析
第5章　カーネルの設計

佐々木研究室
06T4073R 三上健太

カーネルの変換と組み合わせ

- カーネル関数

  - 正定値性を満たせばカーネルトリックの考え方を使える
    → カーネル関数を設計する際に大きな自由度を与えるという意味で重要

- ここでは

  - 正定値性を保つようにカーネルを変換
  - 複数のカーネルがあったときにそれを組み合わせて正定値なカーネルを作る

  上記の基本的な方法についてまとめる

- これを理解すると・・・

  → 多項式カーネルやガウスカーネルがどうして正定値なのか，この他にどのような関数が正定値になるのかがわかるようになる

(a)基本形

- 特徴ベクトルの内積で計算される関数 → 正定値カーネル
- 特徴ベクトルが1次元関数g(x)のとき，それらの積からなるカーネル関数を作成可能

$$k(x,x') = g(x)g(x') \quad \text{- (5.1)}$$

(g(x)が常に定数値を取る関数ならばカーネル関数は正の定数となる)

- 2つのカーネル関数があったとき，その和は正定値となる

$$k_{add}(x,x') = k_1(x,x') + k_2(x,x') \quad \text{- (5.2)}$$

- カーネル関数の積も正定値である.

$$k_{mul}(x,x') = k_1(x,x')k_2(x,x') \quad \text{- (5.4)}$$

- この和と積の関係をもとにどんどん複雑なカーネルを作ることが可能.

(b)組み合わせの例

- 正の定数可算: $k(x,x')+a, \quad (a>0)$
- 正の定数倍: $ak(x,x') \quad (a>0)$
- 正定数の線形和: $a_1k_1(x,x')+a_2k_2(x,x'), \qquad a_1,a_2\geq 0$
- べき乗: $k(x,x')^p$
- 多項式カーネル: $(x^T x'+c)^p$
- 指数関数: $\exp(k(x,x'))$
- コンフォーマル変換: $k_{conf}(x,x')=g(x)g(x')k(x,x')$
- 正規化カーネル: $k_{norm}(x,x')=\dfrac{k(x,x')}{\sqrt{k(x,x)}\sqrt{k(x',x')}}$

(b)組み合わせの例(2)

- 使用例
  - 汎用性を考慮していろいろなカーネルを試し，いいものを選ぶ
  - 実数と離散値のように異なる性質を持つデータが混ざっている場合のカーネル関数設計

- 畳み込みカーネル

$$k_{conv}(x, x') = \sum_{\{x_i\},\{x'_i\}} \prod_{i=1}^{M} k_i(x_i, x'_i)$$

▪ $x = (x_1, ..., x_M)$ ，$x' = (x'_1, ..., x'_M)$ ，xとx’の各部分x_i とx'_i に対して，カーネル関数$k_i(x_i, x'_i)$ が定義されている

▪ xやx’は実数ベクトルに限らずなんらかの「分割」が定義できる任意のデータ構造で構わない

(c)平行移動不変カーネル

- 入力が実数値ベクトルの空間の場合，カーネル関数k(x-x’)を用いることが多い
  → xとx’の相対的な位置関係のみからカーネルの値が決まるという平行移動に関する不変性があるから
- このようなカーネルの代表例：ガウスカーネル

- 定理3：ボホナーの定理

$$k(x-y)=\int_{-\infty}^{\infty}e^{it(y-x)}\sigma(t)dt$$

簡単のため，1次元実数空間を考える.

上式となるσ(t)≧0が存在することがkが正定値であるための必要十分条件
  → 実数空間の確率密度関数のフーリエ変換はすべて正定値カーネルになる

(c)平行移動不変カーネル(2)

- カーネルの形が入力xの差のノルムの関数 $k(\|x-x'\|)$ であるときの正定値性を判定する条件について以下の定理がある

- 定理4：シェーンバーグの定理
  $k(\|x-x'\|)$ が任意の次元のユークリッド空間に対して正定値であるための必要十分条件は, $k(\sqrt{u})$ がuについて[0,∞)で連続，(0,∞)で無限回連続微分可能で，次式を満たすことである.

$$(-1)^j \frac{\partial^j k(\sqrt{u})}{\partial u^j} \geq 0, \qquad u \in (0,\infty), \qquad j = 0,1,2,...$$

グラム行列の設計

- カーネルはカーネル関数k(x,y)ではなく，データ集合に対する正定値行列(グラム行列)Kを定めることによっても定義できる

- カーネル関数の場合と同様に･･･
  - あるグラム行列があったとき，正定値性を保つような変換をして もやはりグラム行列として使うことができる
  - 複数のグラム行列の成分どうしの和や積といった演算もやはり正定値性を保つ
    → グラム行列を組み合わせて新たなグラム行列を作ることも可能

(a)正定値でない類似度・距離からの設計

- サンプル同士の類似度が与えられている場合
  距離から二重中心化(3.44式参照)によってグラム行列に変換したとき
  ↓
  それらが正定値とは限らないという問題点
- 正定値とは限らない行列を正定値にする方法は以下のとおり
  - ・単位行列 I_n のλ倍を加えてKのすべての固有値にλを足す
    (λはKの最小固有値の絶対値より大きくしておく)
  - ・$K = UDU^T$ のように固有値展開し，固有値の並んだ対角行列Dの0以下の成分を強制的に正の小さい値にしたD’を作って $K' = UD'U^T$ という行列をとる
  - ・一般に実対称行列Aが与えられたとき，その行列指数関数exp Aは正定値
    → グラム行列が行列指数関数の形：指数カーネル

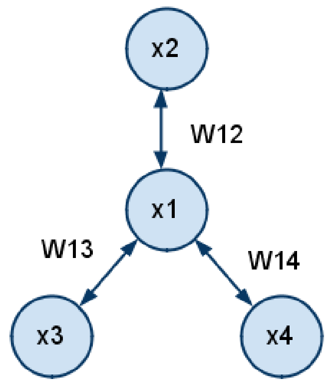
$$\exp A = I + A + \frac{1}{2!}A^2 + \frac{1}{3!}A^3 + \cdots$$

(b)拡散カーネル

- 拡散カーネル

$$K_{dif} = \exp(2\alpha t P)$$

$$\frac{d}{dt}x = \alpha P x, \quad x(t) = \exp(\alpha t P)x(0)$$



- 拡散カーネルはx(0)を標準正規分布でランダムに初期化したときの時刻tにおけるx(t)の共分散行列として定義され，それは2αtPに対する指数カーネルで与えられる
- 複数のWebページ間の関係をモデル化するのに用いることが可能
- それぞれのWebページをグラフに対応させ，ハイパーリンクをそのグラフの枝に対応付けることによって，Webページ全体をグラフ構造とみなす
- 拡散カーネルをWebページの間の類似度を表すものとして考える

(c)補助的な情報に基づくグラム行列の設計

- グラム行列を設計する際に補助的な情報が使える場合がある
- 実際には様々な問題設定が考えられるが，ここでは2つの問題を紹介

  1) 複数の類似度行列が与えられている場合
     それぞれの行列は信頼性がそれほど高くないので，統合して新たな行列を得る

  2) 信頼性が高い類似度行列と低い類似度行列が1つずつ与えられている場合
     ただし，信頼性が高いほうの行列は一部の成分が欠損しているとする.
     信頼性が低い類似度行列を補助情報として用い，欠損値を埋めたい

- これらの問題を解くためには･･･
  → 類似度行列全体のなす空間に幾何学的構造を定めることが有用

(c)補助的な情報に基づくグラム行列の設計(2)

- 詳細は省略
- これらの問題はより一般に定式化すると，半定値計画問題に帰着される
  - 正定値性を満たす行列の線形関数を線形制約のもとで最大化(最小化)する最適化問題
- グラム行列に関していろいろな形で部分的な情報が与えられている場合などに，それを線形制約として導入することによって正定値行列を作る一般的な手法
- ただし，4章の凸二次計画法などよりも一段難しい凸最適化法となる
  → 計算量が大きいことに注意