3. カーネル法の実際

3.1カーネル主成分分析

08t40721 全　太俊

3.1.1 カーネル主成分分析の復習

- カーネルPCAの解:

$$\max a^T \tilde{K}^2 a \quad \text{subject to} \quad a^T \tilde{K} a = 1$$

- 第p主軸:

$$f^{(p)} = \sum_{i=1}^{N} a_i^{(p)} \tilde{\Phi}(X_i) \qquad \text{ただし} \quad a^{(p)} = \frac{1}{\sqrt{\lambda_p}} u^{(p)}$$

- データXの第p主成分：

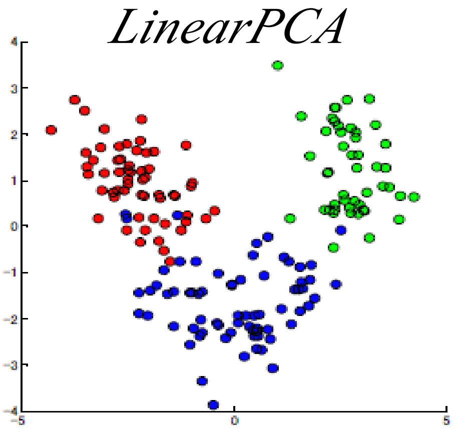
$$\left\langle \tilde{\Phi}(X_i), f^{(p)} \right\rangle = \sqrt{\lambda_p}\, u_i^{(p)}$$

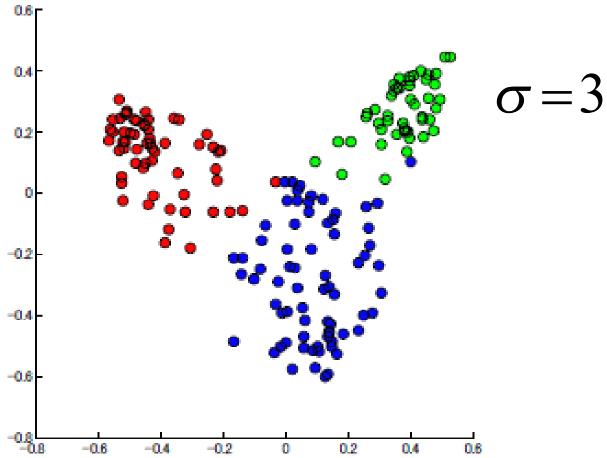
3.1.2 カーネルPCAの応用例

- カーネルPCAの例
  - Wineデータ（13次元、178データ）

- 正定値カーネル
  - 線形カーネル $k(x,y) = x^T y$
  - ガウスカーネル $k(x,y) = \exp(-\|x-y\| / \sigma^2)$
  - 多項式カーネル $k(x,y) = (c + x^T y)^d$

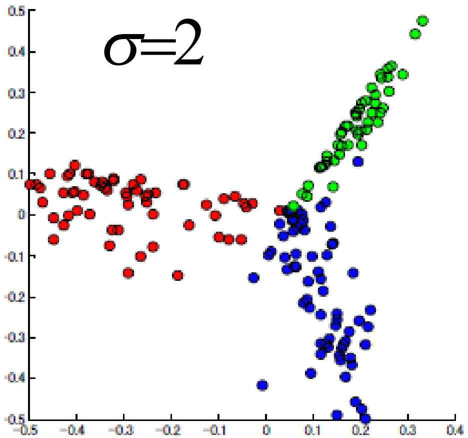
3.1.2 カーネルPCAの応用例

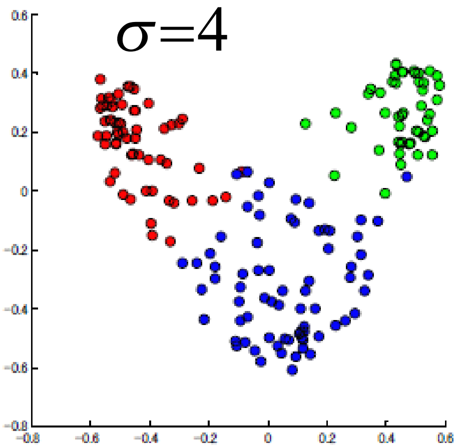


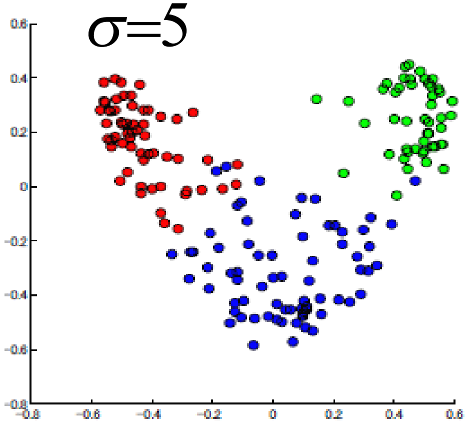


線形の主成分分析

ガウスカーネルよるカーネルPCA







3.1.2 カーネルPCAの応用例

- 結果はカーネルの選択に大きく依存する（カーネル種類、カーネルのパラメータ）
- ガウスカーネルのパラメータが大きくなるほど線形PCAに近づく

$$\exp\left(-\frac{1}{\sigma^2}\|x-y\|\right)=1+2\frac{x^T y}{\sigma^2}-\frac{1}{\sigma^2}(\|x\|^2+\|y\|^2)+O(1/\sigma^4)$$ ← ベキ級数展開

↓ 定数、xとyの一方に依存しない

$$\tilde{K}_{ij}=\frac{2}{\sigma^2}X_i^T X_j+O(1/\sigma^4)$$

3.1.2 カーネルPCAの応用例

- カーネルPCAの雑音除去

　d個の主方向ベクトル $f^{(1)},\ldots\ldots,f^{(d)}$
の張るd次元空間へデータ$\Phi(x)$を正射影した点
を$\Pi(x)$とする。$\Pi(x)$ **はH内でのノイズ除去と考える**

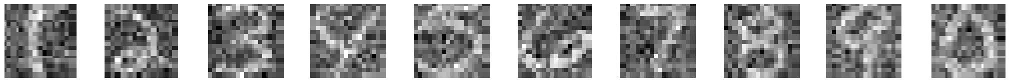
$$\min_{y\in\chi} \|\Phi(y)-\Pi(x)\|^2_{\mathrm{H}_k}$$

$$\Pi(x)=\sum_{j=1}^{N} ck(\cdot,X_j)$$ と書ける

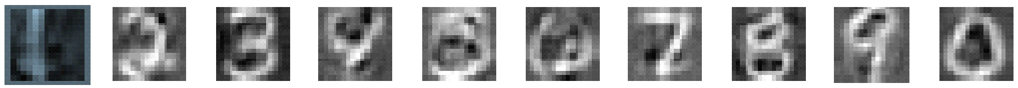
$$\|\Phi(y)-\Pi(x)\|^2_{\mathrm{H}}=k(y,y)-2\sum_{j=1}^{N}c_jk(y,X_j)+\sum_{i,j=1}^{N}c_ic_jk(X_i,X_j$$

カーネルPCAによってノイズ除去した画像

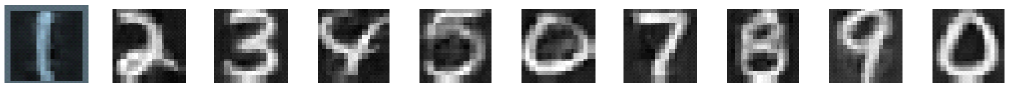
減画像



雑音を付加した画像



線形PCAにより雑音を除去した画像



カーネルPCA(ガウスカーネル)に雑音を除去した画像

→ カーネルPCAのほうがノイズがきれいに除去される