カーネル多変量解析

5.1 カーネルの変換と組み合わせ
5.2 グラム行列の設計

茨城大学工学部
佐々木研究室
荒井悠有

5.1 カーネルの変換と組み合わせ

ここでは
・正定値性を保つようにカーネルを変換
・複数のカーネルを組み合わせて正定値なカーネル
を作る
これらの基本的な方法をまとめる。

(a)基本形

・カーネル関数

$$k(x,x') = g(x)g(x')$$

g(x):特徴ベクトルであり、1次元の関数
g(x)が常に定数値を取る関数なら、カーネル関数は正の定数

・カーネル関数の和と積

$$k_{add}(x,x') = k_1(x,x') + k_2(x,x')$$

$$k_{mul}(x,x') = k_1(x,x')k_2(x,x')$$

それぞれ、正定値となる。

(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： $a_1k_1(x,x')+a_2k_2(x,x') \quad a_1,a_2 \geq 0$
- べき乗： $k(x,x')^p \quad (p$は自然数$)$
- 多項式カーネル： $(x^T x'+c)^p$
- 指数関数： $\exp(k(x,x')) \xrightarrow{\text{テイラー展開}} \exp(x)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{x^m}{m!}$
- 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： $k_{norm}(x,x')=\frac{k(x,x')}{\sqrt{k(x,x)}\sqrt{k(x',x')}}$

x=xのとき1、x≠xのとき-1と1の間に値をとる。

・実際どのように使われるのか？

複数のカーネルを組み合わせるときに、積にするか和にするか迷ってしまう。

（簡単な例）

xとx’が似ていれば1、似ていなければ0という値をとる

↓

積と和を論理積と論理和としてとらえる

↓

設計の際に参考になる

・畳み込みカーネル

xとx'がそれぞれ$x=(x_1,\cdots,x_M)$,$x'=(x'_1,\cdots,x'_M)$のように分割でき、xとx'の各部分x_iとx'_iに対してカーネル関数$k_i(x_i,x'_i)$が定義されている場合を考える。

このとき、和と積を使って

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

として定義されるカーネルを畳み込みカーネルという。

(c)平行移動不変カーネル

平行移動に関する不変性
→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

・ボホナーの定理

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

なる実数値関数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である。

・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、

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

を満たすことである。

このことから、$\exp(-\beta\|x-x'\|^p)$が正定値なのは$0 \leq p \leq 2$ のとき、またはそのときに限るということがわかる。

5.2 グラム行列の設計

-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
によってもカーネルを定義できる。

(a) 正定値でない類似度・距離からの設計

正定値とは限らない行列を正定値にする方法として以下
のような方法がある。

1. どんな正方行列Kも、単位行列I_nのλ倍を加えて$K+\lambda I_n$とすること
によってKのすべての固有値はλだけ増える。
→λをKの最小固有値の絶対値より大きくしておけば正定値行列を
作れる。

2. 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}という行列を取る。

3. 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

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

は正定値である。
グラム行列が行列指数関数の形で書かれるとき、これを指数カーネルと呼ぶ。（カーネル関数の指数関数とは異なる）

＊これら3つの方法では固有ベクトルは変化しないので、サポートベクトルマシンなどには有効だが固有値問題に帰着されるカーネル主成分分析のような手法ではあまり意味がない。

(b) 拡散カーネル

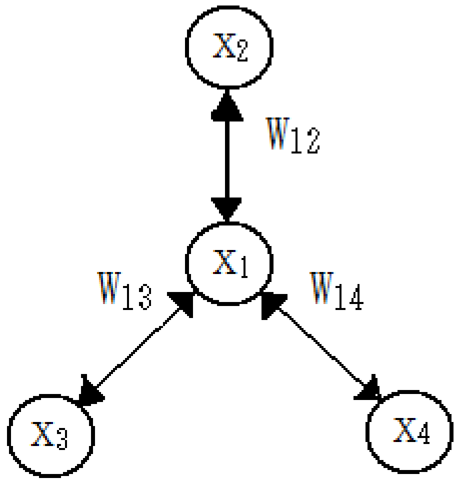
-指数カーネルの具体例として、グラフのラプラシアンを使った拡散カーネルについて説明する。

グラフのラプラシアンPは式(3.31)で定義されている。
→これはグラフ上を熱が伝わっていく物理モデルと対応づけられる。

微分方程式で書けば

$$\frac{d}{dt}x = \alpha Px$$

となり、この解は $x(t) = \exp(\alpha tP)x(0)$ となる。



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る。
これは、2αtPに対する指数カーネル

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

で与えられる。これを拡散カーネルと呼ぶ。

(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

例）

（１）複数の類似度行列が与えられている場合。

→統合してより精度の高い類似度行列を得たい。

（２）信頼性が高い類似度行列と信頼性が低い類似度行列が一つずつ与えられている場合。

→一方の欠損部分をもう一方で補う。

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

＊補足情報＊

1. 正定値行列P全体の空間Sは、Pを座標系と見たときに情報幾何学的な意味で「平らな」空間となる。P^{-1}の場合も同様。

2. n次正定値行列Pと、正定値行列全体の空間の線形部分空間Mがあったとする。点PからMへの自然な射影はダイバージェンスと呼ばれる擬距離

$$D(Q,P)=\frac{1}{2}\{tr(P^{-1}Q)+\log\det P-\log\det Q-n\} \quad \cdots (＊)$$

を最小にするM上の点Qとして与えられる。
P-1に関しては、D（P,Q）を最小にする点Qとして与えられる。

(1)の場合

信頼性の低い類似度行列$P_1,\ldots P_M$が与えられたとき

↓

中心を取ることで信頼性の高い行列Qができると期待できる。

情報幾何の観点からは・・・

P_iとQの間のダイバージェンスの和が最小になるようにQを求めるのが一般的。

しかし

この場合$\sum_{i=1}^{M} D(P_i, Q)$ 、$\sum_{i=1}^{M} D(Q, P_i)$ のどちらを最小にするかで結果が異なる。

・前者の場合

$$Q = \frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} P_i$$

という単純平均になる。

・後者の場合

$$Q = \left(\frac{1}{M}\sum_{i=1}^{M} P_i^{-1} \right)^{-1}$$

という行列になる。

＊どちらを選ぶかは場合によって異なる。

・（2）の場合

-信頼性の低い行列P
-信頼性は高いが一部が欠損している行列Q

↓

Qの欠損値を埋める問題を考える。

Qはブロック行列

$$Q = \begin{pmatrix} Q_{vv} & Q_{vh} \\ Q^T{}_{vh} & Q_{hh} \end{pmatrix}$$

という形をしており、Q_{vv}だけがわかっていると仮定する。

補足情報の2より、PからSへの射影は、D(Q,P)を最小とするQとして求めるのが自然である。
Pの逆行列を

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} R_{vv} & R_{vh} \\ R^{T}{}_{vh} & R_{hh} \end{pmatrix}$$

と分解すれば、式(＊)からQ^{-1}のうちQ_{vv}ブロック以外の部分がP^{-1}と等しくなるので＊

$$Q_{vh} = -Q_{vv} R_{vh} R^{-1}{}_{hh}$$

$$Q_{hh} = R^{-1}{}_{hh} + R^{-1}{}_{hh} R^{T}{}_{vh} Q_{vv} R_{vh} R^{-1}{}_{hh}$$

という閉形式で求められる。

＊　D(Q,P)を微分する際に、対称行列A,Bについて

$$\frac{\partial}{\partial A} tr(AB) = B, \quad \frac{\partial}{\partial A} \log\det A = A^{-1}$$

が成り立つことを使う。