

目次

まえがき

第1章 現代の多変量解析とは	1
1.1 現代流の多変量解析とは	2
(a) データマイニング：隠れた構造の発見	2
(b) テーラーメイド多変量解析：個性・多様化への対応	3
1.2 カーネル法とはどんなものか	4
(a) 関数の推定	4
(b) 基本の線形モデル	4
(c) カーネル法登場	6
(d) 正則化：鋭すぎる刃物を鈍らせて使う	9
1.3 カーネル法の利点と応用分野	11
(a) カーネル多変量解析の特徴	11
(b) カーネル法の応用分野	12
1.4 カーネル法の種類：問題設定と計算法	13
(a) 問題設定による分類	13
(b) 計算法による分類	16
第2章 カーネル多変量解析の仕組み	19
2.1 カーネル関数とは何か：特徴抽出からの導入	20
2.2 正定値性からの導入	25
2.3 確率モデルからの導入	30
(a) 線形モデルのベイズ推論	30
(b) 正規過程からカーネルへ	32
2.4 汎化能力の評価とモデル選択	34

(a) クロスバリデーション 35

(b) 線形モデルの leave-one-out クロスバリデーション 36

(c) 具体例 36

第3章 固有値問題を用いたカーネル多変量解析 41

3.1 カーネル主成分分析 42

(a) 低次元構造の抽出と情報量 42

(b) カーネル主成分分析と固有値問題 43

(c) カーネル主成分分析の問題点とデータ依存カーネル 47

3.2 次元圧縮とデータ依存カーネル 51

(a) 次元圧縮とカーネル法の等価性 51

(b) ラブラシアン固有マップ法：
グラフ上の物理モデルに基づく次元圧縮 52

(c) ISOMAP：多様体上の距離に基づく次元圧縮 56

(d) 局所線形埋め込み法：
線形モデルの貼り合わせによる次元圧縮 60

3.3 クラスタリング 63

(a) カーネル k -平均法 64

(b) スペクトラルクラスタリング 65

3.4 判別分析と正準相関分析 68

(a) カーネル判別分析 69

(b) カーネル正準相関分析 73

3.5 カーネル独立成分分析 79

(a) 独立成分分析の概略 80

(b) 主成分分析による無相関化 81

(c) 独立性の規準 82

第4章 凸計画問題を用いたカーネル多変量解析 85

4.1 サポートベクトルマシン 86

(a) カーネル最小二乗クラス識別 86

(b) サポートベクトルマシン：
二乗誤差から区分線形誤差へ 87

(c) 解の条件とスパース性 90

(d) 双対問題による計算の単純化 94

(e) サポートベクトルマシンの幾何的意味：
マージン最大化 96

(f) サポートベクトルマシンの汎化能力 98

4.2 サポートベクトル回帰 99

(a) 二乗誤差から ϵ -不感応関数へ 99

(b) 双対問題の導出 100

(c) サポートベクトル回帰のスパース性 101

(d) 損失関数の一般化 102

4.3 損失関数も最適化する： ν トリック 103

4.4 外れ値・新規性検出 106

(a) 1クラス ν -サポートベクトルマシン 107

(b) データを包含する球 109

4.5 凸二次計画問題の基本解法 111

4.6 その他の話題 112

(a) L_1 正則化によるスパース化 112

(b) フーバー型ロバスト推定 115

(c) カーネルロジスティック回帰：
確率モデルによるクラス識別 116

(d) 多クラス識別 117

第5章 カーネルの設計 123

5.1 カーネルの変換と組み合わせ 124

(a) 基本形 124

(b) 組み合わせの例 125

(c) 平行移動不変カーネル 127

5.2	グラム行列の設計	128
(a)	正定値でない類似度・距離からの設計	128
(b)	拡散カーネル	129
(c)	補助的な情報に基づくグラム行列の設計	130
5.3	確率モデルに対するカーネル	133
(a)	フィッシャーカーネル	133
(b)	周辺化カーネル	134
5.4	複雑なデータ構造に対するカーネル	135
(a)	カーネル設計の基本方針：分割統治と動的計画法	135
(b)	多項式カーネルと動的計画法	137
(c)	文字列カーネル	140
(d)	列から木・グラフへ	144
第6章 カーネルの理論 147		
6.1	特徴抽出からカーネルへ	148
(a)	特徴ベクトルとパラメータの内積	148
(b)	再生核ヒルベルト空間の構成	150
(c)	再生性から特徴ベクトルへ	152
(d)	再生核のテンソル積	154
6.2	正定値性	155
(a)	正定値性から再生核へ	155
(b)	実数ベクトルに対するカーネル関数	157
(c)	グラム行列からカーネルへ	159
6.3	正定値行列の幾何	160
(a)	指数分布族の情報幾何	160
(b)	モデルへの射影	162
第7章 汎化と正則化の理論 165		
7.1	正則化：逆問題と不良設定問題	166

7.2	正則化とカーネル法	168
(a)	リプレゼンター定理	169
(b)	正則化からカーネルへ	171
(c)	正規過程：正則化と確率モデル	173
7.3	関数の複雑さと汎化の理論	176
(a)	経験損失と期待損失	177
(b)	大数の法則の一般化	178
(c)	ラデマッハー複雑度による評価	182
(d)	カーネル関数の複雑度	186
(e)	VC次元との関係	187

A 付 録 191

A.1	回帰問題の leave-one-out クロスバリデーション誤差の導出	191
A.2	ラグランジュ関数と双対問題	193
A.3	文献案内と謝辞	196

関連図書 199

索引 205