論文メモ

文献番号	0014
日付	2021 年 12 月 13 日
名前	武川海斗

文献情報

著者	Motonobu Kanagawa, Philipp Hennig, Dino Sejdinovic, and Bharath K Sriperumbudur
英文タイトル	Gaussian Processes and Kernel Methods: A Review on Connentions and Equivalences
和文タイトル	ガウス過程とカーネル法: 接続と等価性に関するレビュー
書誌情報	arXiv:18107.02582v1[stat.ML], 2019
キーワード	なし

1 論文の要約

本論文は，ガウス過程とカーネル法の関係性についての研究をまとめた解説論文である．ガウス過程はノンパラメトリックな手法であるが，ベイズ統計学に基づいて，分散についてカーネル関数で表現する．一方，カーネル法とは，入力データを高次元に写像し，再生核ヒルベルト空間で内積計算を行うことで，次元の呪いの影響を受けない手法である．両者にはカーネル関数を通じて，密接な関係がある．特に回帰に関して，ガウス過程回帰とカーネルリッジ回帰に関して，等価性を持つことが知られている．しかし，ガウス過程では再生核ヒルベルト空間を通じてカーネルを扱わない点に関して，両者は異なるという意見がある．本論文のメッセージとして，確かに，同様の空間上で計算を行わないが，ガウス過程における計算空間も，再生核ヒルベルト空間の累乗として存在することを主張している．

2 ガウス過程の定義

本論文では，ガウス過程の定義について触れている．卒業論文においても引用した箇所であるため，本報告書においてもまとめを行う．以下に定義とその解釈について述べる．

空ではない $\boldsymbol{\chi}$ が存在し，平均 $m : \boldsymbol{\chi} \to \Re$，正定値性を持つ共分散行列 $K : \boldsymbol{\chi} \times \boldsymbol{\chi} \to \Re$ が存在する．このとき，m と K を要素にもつランダムな関数 $f : \boldsymbol{\chi} \to \Re$ をガウス過程と呼び，$\mathrm{GP}(m, K)$ と表記する．ここで，$n \in N$ の有限集合 $\boldsymbol{X} = (x_1, x_2, \cdots, x_n) \subset \boldsymbol{\chi}$ に対して，$\boldsymbol{f}_x = (\boldsymbol{f}(x_1), \boldsymbol{f}(x_2), \cdots, \boldsymbol{f}(x_n)) \in \Re^n$ は多変量正規分布 $\mathrm{N}(\boldsymbol{m}(\boldsymbol{x}), \boldsymbol{K})$ に従う．ただし,

$$\boldsymbol{m}(\boldsymbol{x}) = (m(x_1), m(x_2), \cdots, m(x_n))^T \tag{1}$$

$$\boldsymbol{K} = \{k(x_i, x_j) \mid i = 1 \sim n, j = 1 \sim n\} \tag{2}$$

に従う．

ここで，$\boldsymbol{f}$ がガウス過程である場合，平均関数 $\boldsymbol{m}(\boldsymbol{x})$ と正定値カーネル $\boldsymbol{K}$ が存在することを意味する．逆に，平均関数 $\boldsymbol{m}$, 正定値カーネル $\boldsymbol{K}$ が存在する場合，対応するガウス過程 $\boldsymbol{f} \sim \mathrm{GP}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{K})$ が存在する．このように，ガウス過程 $\boldsymbol{f} \sim \mathrm{GP}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{K})$ と、平均関数 $\boldsymbol{m}$ と正定値カーネル $\boldsymbol{K}$ のペアには、一対一の対応関係がある．そのため，入力データが観測されれば，$\boldsymbol{f}$ の事後分布を求めることができ，ガウス過程はベイズ統計の立場から見たカーネル法であると言える．

3　特に重要な関連研究

本論文は，ガウス過程とカーネル法との関連性についてまとめた論文であり，新規手法については提案されていない．従って，本節では，今後の研究で重要となる論文について紹介する．

3.1　A Hilbert space embedding for distributions

一般に，確率分布に対してカーネル法を用いる場合，相互情報量、エントロピー、カルバック・ライブラー発散などの量を計算する必要がある．そこで，参考文献 [1] では，こういった中間密度推定を必要とせずに，分布間の距離を推定する手法について提案を行っている．この理論を考える上で重要となるのが，再生核ヒルベルト空間において，確率分布をどのように扱うかという問題であり，本論文ではその紹介と説明を行っている．確率分布とカーネル法との間の橋渡しを行っている論文であり，今後重要であると言える．

3.2　Kernel measures of conditional dependence

参考文献 [2] は，再生カーネルヒルベルト空間上の正規化交差共分散演算子に基づく，確率変数の条件付き依存性の新しい尺度の提案を行っている．この依存性を，客観的な尺度で評価することは，カーネル法に拡張できるのかを評価できることにつながる．

次に読むべき論文のリスト

[1] A. Smola, A. Gretton, L. Song, and B. Scholkopf. A Hilbert space embedding for distributions. *In Proceedings of the International Conference on Algorithmic Learning Theory*, volume 4754, pp. 13-–31. Springer, 2007.

[2] K. Fukumizu, A. Gretton, X. Sun, and B. Scholkopf. Kernel measures of conditional dependence. *In Advances in Neural Information Processing Systems 20*, pp. 489-–496, 2008.