

第I部 内容

1 start

第1回で紹介したいもの

- 最低限の周辺知識+記号
- 前半の主定理 (Thm1) と意味
- Claim1 の証明を含めた論文の13章

1.1 論文概要

この論文では多様体仮説が成り立っているかを確認できるアルゴリズムがある意味で提示している。数学的に示していることをざっくりとした、日本語で説明すると以下の二点である。

- ある多様体に対して、多様体仮説が成り立つと仮定した時、実際に多様体仮説が成り立つ多様体 M を数学的に構成できた。
- 上の多様体 M を具体的に求めるアルゴリズムを構成した。

完全に勘違いしていたが、数学的な条件では、入力となるデータに関する性質を記述できていないので、多様体仮説が成り立つことは確認できない。この論文では、多様体仮説が成り立つかはわからないが、多様体仮説が成り立つならば、求めたい多様体(とっていいもの)を定義し、求めるアルゴリズムを定義できたので、実際に実験してみればいいはずだと主張している。以下では、結果を具体的に記述するため、最低限の数学的な用語を定義する。

1.2 基本的な定義

Definition 1.1. 有限次元とは限らない \mathcal{H} を \mathbb{R} -ベクトル空間が以下を満たす時、ヒルベルト空間という。

- 内積が定義できる。すなわち、以下を満たす写像 $\langle \cdot, \cdot \rangle: \mathcal{H} \times \mathcal{H} \rightarrow \mathbb{R}$ が存在する。
 1. 任意の $x_1, x_2, y \in \mathcal{H}$ に対し, $\langle x_1 + x_2, y \rangle = \langle x_1, y \rangle + \langle x_2, y \rangle$
 2. 任意の $x, y \in \mathcal{H}, a \in \mathbb{R}$ に対し, $\langle ax, y \rangle = a \langle x, y \rangle$
 3. 任意の $x, y \in \mathcal{H}$ に対し, $\langle x, y \rangle = \langle y, x \rangle$

4. 任意の $x \in \mathcal{H}$ に対し, $\langle x, x \rangle \geq 0$ であり, $\langle x, x \rangle = 0$ と $x = 0$ は同値である.

- 内積が定める距離について完備である.

Remark. 上で定めた内積のことを正定値対象双線型形式という.

Remark. $x, y \in \mathcal{H}$ に対し, $d(x, y) := \sqrt{\langle x - y, x - y \rangle}$ とすると距離の公理を満たす. 距離の公理とは以下の 3 つのこと.

1. $d(x, y) = d(y, x)$
2. $d(x, y) = 0$ は $x = y$ と同値
3. $d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z)$

Remark. 距離空間 X が完備とは, 任意のコーシー列 $\{x_n\}_{n \in \mathbb{Z}_{\geq 0}}$ に対し, 収束先 $x \in X$ が存在すること.

Example 1.2. \mathbb{R}^n は標準内積により, ヒルベルト空間になる.

この論文で使われる”多様体”の定義をする.

Definition 1.3 (reach). M を H の部分集合とし. $x \in \mathcal{H}$ に対し, $d(x, M)$ を $\inf_{y \in M} d(x, y)$ とする. 実数 τ が M の **reach** とは, $d(x, M) < \tau$ となる任意の x に対し, $y \in M$ が存在し, y と異なる任意の $z \in M$ に対し, $d(x, z) > d(x, M) = d(x, y)$ となること.

Definition 1.4 (Tangent Space). H を可分ヒルベルト空間とする. 閉集合 $A \subset H$ と $a \in A$ に対し, $Tan^0(a, A)$ を $v \in H$ で, 任意の ϵ に対し, ある $b \in A$ が存在し, $0 < |a - b| < \epsilon$ と, $|\frac{v}{|v|} - \frac{b-a}{|b-a|}| < \epsilon$. を表す. $Tan(a, A)$ を $\{x \in H | x - a \in Tan^0(a, A)\}$ とする.

Proposition 1.5. A を \mathbb{R}^n の閉部分集合とする. この時

$$reach(A)^{-1} = \sup\{2|b - a|^{-2}d(b, Tan(a, A)) | a, b \in A\}$$

Definition 1.6 (C^r -submfd). ヒルベルト空間 \mathcal{H} の閉集合 M が d 次元 C^r 級部分多様体とは, 以下が成り立つことである. 任意の $p \in M$ に対し, $x \in U$ となる \mathcal{H} の開部分集合と C^r 級写像 $\phi: U \rightarrow \mathcal{H}$ で $\phi|_{U \cap M}$ は中への微分同相写像であり, その像が d 次元アフィン空間 V (ある点 $x \in \mathcal{H}$ が存在し, $V - x$ が d 次元のベクトル空間になる) のインターセクションでかけるものが存在する. $B_{\mathcal{H}} := \{x \in \mathcal{H} | d(x, x) \leq 1\}$ とする. $\mathcal{G}(d, V, \tau)$ を d 次元で体積 V 以下で **reach** が τ 以上で $B_{\mathcal{H}}$ に含まれる C^r 級多様体全体のなす集合とする.

Remark. 多様体は普通の数学書では上記のようには定義されない. \mathcal{H} を固定して考えたいがために, 上記のように定義したのだと思われる.

Remark. この論文では、後でもう一つ多様体と呼ぶものが出てくる。 C^r 級部分多様体が必ずしも後で出てくる多様体とは限らないことに注意せよ。

Definition 1.7. (Ω, F, P) が確立空間とは、 Ω をある集合とし、 F を Ω 上の σ -加法族であり、 P は非負測度であり、 $P(\Omega) = 1$ となる。

Definition 1.8. $X : \Omega \rightarrow [-\infty, \infty]$ が確立変数とは任意の $a \in [-\infty, \infty]$ で、 $\{x \in \Omega \mid X(x) \leq a\} \in F$ となること。

Definition 1.9. X を確立変数とした時、 $F_X(x) = P(X < x)$ と書ける時、確立分布関数という、

Definition 1.10. 確立分布関数とは

1.3 多様体仮説

この論文で考える多様体仮説とそのために必要な用語を定義する。可分なヒルベルト空間を \mathcal{H} , その単位球を $B_{\mathcal{H}}$, $B_{\mathcal{H}}$ 上の確立分布関数を P とする。

$$\mathcal{L}(M, P) := \int_{x \in B_{\mathcal{H}}} d(x, M)^2 \frac{dP(x)}{dP(x)} dx.$$

とする。

Definition 1.11. 確立分布関数 P で、 $i.i.d$ (独立試行) が行われた時、以下が成り立つことを多様体仮説と呼ぶ。ある $M \in \mathcal{G}(d, CV, c\tau)$ が存在し、 $\mathcal{L}(M, P) \leq C\epsilon$ となる。

Remark. 論文中でこれを多様体仮説と直接呼んではないが、内容から判断して多様体仮説と呼ぶことにした。

Remark. この時点でもわかるように、 d, C, V, τ としてどのような値を取るべきかは不明。

1.4 主結果その 1

1 つめの定理を述べる。

Theorem 1.12. ある $r > 0$ に対し、

$$U_{\mathcal{G}(1/r)} := CV\left(\frac{1}{\tau^d} + \frac{1}{(\tau r)^{d/2}}\right)$$

とする。また、

$$s_{\mathcal{G}}(\epsilon, \delta) := C\left(\frac{U_{\mathcal{G}}(1/\epsilon)}{\epsilon^2} (\log^4(\frac{U_{\mathcal{G}}(1/\epsilon)}{\epsilon})) + \frac{1}{\epsilon^2} \log \frac{1}{\delta}\right)$$

とする。 $s \geq s_G(\epsilon, \delta)$ とし、 $x = \{x_1, \dots, x_s\}$ を確率測度 P による独立試行により、得られた集合とする。 P_X を X 上の一様確率測度とする。(どの元が出る確率が等しい) M_{erm} を $\mathcal{G}(d, V, \tau)$ の元であって、

$$L(M_{erm}(x), P_X) - \inf_{M \in \mathcal{G}(d, V, \tau)} L(M, P_X) < \frac{\epsilon}{2}$$

を満たし、以下を最初にするものとする。

$$\sum_{i=1}^s d(x_i, M)^2$$

この時、

$$\mathbb{P}[L(M_{erm}(x), P)] - \inf_{M \in \mathcal{G}(d, V, \tau)} L(M, P) < \epsilon > 1 - \delta$$

となる。

Remark. この定理が何を示しているかというと、 $L(M, P)$ の極小値に十分近い値を取る、多様体 $M_{erm}(x)$ を構成できることが言えた。 M_{erm} は最適化問題の解として得られるので、極小値自体よりもかなり具体的になっている。特に、 M_{erm} が確立を計算しなくても求められるのがよい。基本的に P_X は未知であることを前提に問題と解くので、 P_X に依存しないのは強い結果である。

Remark. 仮定からわかるように、 ϵ, δ の値にも強く依存する。だが、これらとして何を取るべきかはまだ、わかっていない。本当は計算してみて、どのくらい大きい s が必要化推測するべきだが…。

第II部

論文そのもの

1 Introduction

多様体仮説について解説する。

参照性を高めるため、章立てはや定理番号は論文と合わせる。必要な範囲で数学的な用語、意味論をまとめて紹介したい。この論文は一言で言うならば、"In this paper, we take a "worst case" viewpoint of the Manifold Learning problem." となる。

最初にこの論文で使う記号の定義を説明する。 H を可分な Hilbert Space(おそらく \mathbb{R} ベクトル空間) $|\cdot| : H \rightarrow \mathbb{R}$ をヒルベルト空間のノルムとし、 $d(x, y) := |x - y|$ で距離を定める。 $B_H := \{x \in H \mid |x| \leq 1\}$ とし、 P を B_H 上の確率測度とする。 M を B_H の閉部分集合とし、 $x \in B_H$ に対し、

$d(x, M) := \inf_{y \in M} |x - y|$ とし、 $\mathcal{L}(M, P) := \int d(x, M)^2 dP(x)$ とする。確率測度 P で i.i.d(互いに独立) に分布するとする。しかし、 P は未知とする。This is a worst-case view in the sense that no prior information about the data generating mechanism is assumed to be available or used for the subsequent development

In order to state the problem more precisely, we need to describe the class of manifolds within which we will search for the existence of a manifold which satisfies the manifold hypothesis. Let M be a submanifold of H . The reach $\tau > 0$ of M is the largest number such that for any $0 < r < \tau$, any point at a distance r of M has a unique nearest point on M . Let $\mathcal{G}_e = \mathcal{G}_e(d; V; \tau)$ を d 次元の B_H の C^2 部分多様体であって、体積が V 以下で、reach が τ 以上のものである。 P を確率分布とする。(測度との関係は?)(x_1, x_2, \dots) を iid な分布とする。(H は無限次元であってもよい。)

The test for the Manifold Hypothesis answers the following affirmatively: Given error ϵ , dimension d , volume V , reach and confidence $1 - \delta$, is there an algorithm that takes a number of samples depending on these parameters and with probability $1 - \delta$ distinguishes between the following two cases (as least one must hold):

- Whether there is a

$$M \in \mathcal{G}_e = \mathcal{G}_e(d; CV; \tau/C)$$

such that

$$\int d(M; x)^2 dP(x) < C\epsilon$$

- Whether there is no manifold

$$M \in \mathcal{G}_e(d, V/C; C\tau)$$

such that

$$\int d(M, x)^2 dP(x) < \epsilon/C$$

ただし、 C は d のみ依存する。

Empirical Loss $L_{emp}(M)$ を

$$L_{emp}(M) = \frac{1}{s} \sum_{i=1}^s d(x_i, M)^2$$

とする。 ***** あとで埋める ***** M_A の定義がわからなかったなので、次の subsection に移動した。

1.1 Definitions

Definition 1.1 (reach). *Let M be a submanifold of H . The reach $\tau > 0$ of M is the largest number such that for any $0 < r < \tau$, any point at a distance r of M has a unique nearest point on M .*

Definition 1.2 (Tangent Space). H を可分ヒルベルト空間とする。閉集合 $A \subset H$ と $a \in A$ に対し、 $Tan^0(a, A)$ を $v \in H$ で、任意の ϵ に対し、ある $b \in A$ が存在し、 $0 < |a - b| < \epsilon$ と、 $|\frac{v}{|v|} - \frac{b-a}{|b-a|}| < \epsilon$. を表す。 $Tan(a, A)$ を $\{x \in H | x - a \in Tan^0(a, A)\}$ とする。

Proposition 1.3. A を \mathbb{R}^n の閉部分集合とする。この時

$$reach(A)^{-1} = \sup\{2|b - a|^{-2}d(b, Tan(a, A)) | a, b \in A\}$$

Definition 1.4 (C^r -submfd).

We assume that $\tau < 1$ and $r = 2$. ***** あとで埋める ***** 燃え尽きました。

2 Sample complexity of manifold fitting

we show that if instead of estimating a least-square optimal manifold using the probability measure, we randomly sample sufficiently many points and then find the least square fit manifold to this data, we obtain an almost optimal manifold. つまり、確率が一番小さい多様体というものを見つけなくても、適当に十分な点を取れば、だいたい欲しい図形を取れる。最小化という作業が不要。(つまり学習のタスクが少ない) を主張したい。

Definition 2.1 (Sample Complexity). $\epsilon, \delta \in \mathbb{R}, X$ を位相空間、 F を $f : X \rightarrow \mathbb{R}$ 全体のなす集合 $s = S(\epsilon, \delta, F)$ を以下が成り立つ最小の実数とする。ある $A : X^s \rightarrow F$ が存在し、 X 上の任意の確率分布に対し、 $(x_1, \dots, x_s) \in X^s$ が P の *i.i.d* な列であって、 $f_{out} := A(x_1, \dots, x_s)$ が以下を満たすとする。

$$\mathbb{P}[\mathbb{E}_{x|P} f_{out}(x) < (\inf_{f \in F} \mathbb{E}_{x|P} f) + \epsilon] > 1 - \delta$$

Theorem 2.2. ある $r > 0$ に対し、

$$U_{\mathcal{G}(1/r)} := CV(\frac{1}{\tau^d} + \frac{1}{(\tau r)^{d/2}})$$

とする。また、

$$s_{\mathcal{G}}(\epsilon, \delta) := C(\frac{U_{\mathcal{G}}(1/\epsilon)}{\epsilon^2}(\log^4(\frac{U_{\mathcal{G}}(1/\epsilon)}{\epsilon})) + \frac{1}{\epsilon^2} \log \frac{1}{\delta})$$

とする。 $s \geq s_{\mathcal{G}}(\epsilon, \delta)$ とし、 $x = \{x_1, \dots, x_s\}$ を確率測度 P による独立試行によるえられた集合とする。 P_X を X 上の一様確率測度とする。 (どの元が出る確率が等しい) M_{erm} を $\mathcal{G}(d, V, \tau)$ の元であって、

$$L(M_{erm}(x), P_X) - \inf_{M \in \mathcal{G}(d, V, \tau)} L(M, P_X) < \frac{\epsilon}{2}$$

を満たし、以下を最初にするものとする。

$$\sum_{i=1}^s d(x_i, M)^2$$

この時、

$$\mathbb{P}[L(M_{erm}(x), P)] - \inf_{M \in \mathcal{G}(d, V, \tau)} L(M, P) < \epsilon > 1 - \delta$$

となる。

Claim 1. $M \in \mathcal{G}(d, V, \tau)$ とし、 Π_x を $\mathcal{H} \rightarrow \text{Tan}(x, M)$ への射影とする。 十分大きい (control された?) 定数 C に対し、

$$U := \{y \mid |y - \Pi_x y| \leq \tau/C\} \cap \{y \mid |x - \Pi_x y| \leq \tau/C\}$$

とする。 この時、 $C^{1,1}$ 級関数 $F_{x,U} : \Pi_x(U) \rightarrow \Pi_x^{-1}(\Pi_x(0))$ で以下を満たすものが存在する。

1. $F_{x,U}$ の Lipschitz constant of the gradient が C 以下である。
- 2.

$$M \cap U = \{y + F_{x,U}(y) \mid y \in \Pi_x(U)\}$$

3 Proof of CLAIM 1

3.1 Constans

D is a fixed integer. Constants c, C, C' etc depend only on D . These symbols may denote different constants in different occurrences, but D always stays fixed.

3.2 D-planes

\mathcal{H} をヒルベルト空間とする。 (無限次元でもよい) D -plane を \mathcal{H} の D 次元部分ベクトル空間とする。 DPL で D -plane 全体のなす空間を表す。 $\Pi, \Pi' \in DPL$ に対し、 直交変換 (内積が不変な変換) $T : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ であって、 $T(\Pi) = \Pi'$ とする。 これ全体のなす集合を $A_{\Pi, \Pi'}$ とする (自分オリジナル)。 この時、

$$\text{dist}(\Pi, \Pi') := \inf_{T \in A_{\Pi, \Pi'}} \|T - I\|$$

で定める。 (DPL, dist) は距離空間になる。 (未確認)

3.3 Patches

D -plane Π に対し,

$$\Psi : B_\Pi(0, r) \rightarrow \Pi^\perp$$

を $C^{1,1}$ (定義不明) で $\Psi(0) = 0$ とする. この時, a patch of radius r over Π centered at 0 とは,

$$\Gamma = \{x + \Psi(x) \mid x \in B_\Pi(0, r)\}$$

をさす. さらに

$$\|\Gamma\|_{C^{1,1}(B_\Pi(0, r))} := \sup_{x \neq y \in B_\Pi(0, r)} \frac{\|\nabla \Psi(x) - \nabla \Psi(y)\|}{\|x - y\|}$$

とする. ここで $\nabla \Psi(x) : \Pi \rightarrow \Pi^\perp$ は $T_x \Pi \rightarrow T_x \Pi^\perp$ のこと. ただし, $\Pi \sim T_x \Pi$ を使って同一視している.

もし $\nabla \Psi(0) = 0$ (写像) が成り立っている場合, Γ を a patch of radius r tangent to Π at its center 0 という.

Lemma 3.1. Γ_1 を Π_1 上の半径 r_1 で中心 z_1 で Π_1 に接している patch とする. $z_2 \in \Gamma_1$ で $\|z_2 - z_1\| < c_0 r_1$ を満たすとする.

$$\|\Gamma_1\|_{C^{1,1}(B_\Pi(z_1, r_1))} \leq \frac{c_0}{r_1}$$

とする. $\Pi_2 \in DPL$ で $\text{dist}(\Pi_2, \Pi_1) < c_0$ とする. この時, Π_2 上の半径 $c_1 r_1$ で中心 z_2 の patch Γ_2 で以下を満たすものが存在する.

$$\|\Gamma_2\|_{C^{1,1}(B_\Pi(0, c_1 r_1))} \geq \frac{200c_0}{r_1}$$

と

$$\Gamma_2 \cap B_{\mathcal{H}}(z_2, \frac{c_1 r_1}{2}) = \Gamma_1 \cap B_{\mathcal{H}}(z_2, \frac{c_1 r_1}{2})$$

Proof. わからん... 恐らく陰関数定理を使いたいのだろうが, 条件を満たす Γ の一意性が言えないような... \square

3.4 Imbedded manifolds

$M \subset \mathcal{H}$ が "compact imbedded D-manifold" (for short, just a "manifold") とは, 以下が成り立つことである.

- M が compact

-