

平成 21 年 4 月 1 日現在

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2006～2008

課題番号：18700001

研究課題名（和文） 再生核ヒルベルト空間と機械学習の数理

研究課題名（英文） Mathematical Analyses of Reproducing Kernel Hilbert Spaces for Machine Learning

研究代表者

田中 章 (TANAKA AKIRA)

北海道大学・大学院情報科学研究科・助教

研究者番号：20332471

研究成果の概要：機械学習とは、既知の入出力の組を用いて未知の入力に対する出力を推定する問題である。近年この分野において、カーネル関数と呼ばれる強力な道具立てが用いられるようになり、推定精度が劇的に向上したが、その理論的な性質については多くが未知であった。本研究により、理論的に多くの問題に適用可能なカーネルの構成法や、ある種のカーネルの族の中で、最適な学習結果が得られるカーネル関数の性質等を理論的に明らかにした。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2006 年度	1,200,000	0	1,200,000
2007 年度	1,100,000	0	1,100,000
2008 年度	1,100,000	330,000	1,430,000
年度			
年度			
総計	3,400,000	330,000	3,730,000

研究分野：総合領域

科研費の分科・細目：情報学・情報学基礎

キーワード：再生核ヒルベルト空間, 機械学習, カーネル, 計量, 相関構造

## 1. 研究開始当初の背景

パターン認識や回帰推定、密度推定等に代表される、いわゆる機械学習の分野において、カーネルトリックと呼ばれる技術がここ 10 年ほどの間に広く認知されるようになり、とりわけ応用面に関する研究が爆発的に発展したことは記憶に新しい。その旗頭は、Vapnik によるサポートベクターマシンであり、他にも、カーネル・フィッシャー判別分析、カーネル主成分分析、カーネル・リッジ回帰等、枚挙に暇がないほど、今や、様々な

手法にカーネルトリックの技術が応用されている。これらの手法におけるカーネル関数の位置付けは、システムの入力を(無限次元を含む)高次元の特徴空間へ写像するとともに、当該特徴空間における内積を規定し算出する道具立てである、と解釈されるのが一般的である。しかしながら、旧来の解釈の下で機械学習を考えた場合、

(1) 学習機械に対して何らかの恣意的なモデルを想定する必要が生じるが、その理論的な正当性が明確でない。

(2)例えば、カーネル・リッジ回帰において顕著に見られるように、線形の問題として、ユークリッド空間の内積の線形性を拠り所に求めた解に対して ad hoc にカーネル関数を適用しているため、学習の定式化において表明した最適性と解の関連が不明である。

(3)カーネル関数をどのように選択するかという問題を学習の枠組の中で扱うことができない。このことは、何らかの恣意的な基準によりカーネル関数を選択せざるを得ないということを意味するが、当該基準の理論的な正当性は、それほど自明ではない。

等の問題があり、応用面での発展とは裏腹に、その理論的な解明は置き去りにされている感が拭えない。

ところで、再生核ヒルベルト空間の理論によれば、カーネル関数とは、関数の族がなすヒルベルト空間に、直交基底(直交関数系)とそれに基づく計量を与えるものであると解釈できることは(数学的には)周知の事実である。東京工業大学の小川らの研究グループは、この理論に基づき、射影学習という新たな学習の枠組を構築した。射影学習の理論によれば、学習は、未知の関数から所与の訓練データの出力を与える線形写像の逆問題として記述される。この枠組においてカーネル関数が果たす役割は、推定対象である未知の関数が属する再生核ヒルベルト空間を規定することであり、学習の良さは、未知関数と推定関数の距離を、当該再生核ヒルベルト空間の計量を用いて評価しているものと解釈される。従って、この理論によれば、カーネル関数とは、何らかの外的基準により恣意的に選ぶべき対象などではなく、少なくとも未知関数と推定関数の距離が定義されるように、すなわち未知関数が当該再生核ヒルベルト空間に属するように規定されるべきものであることが示唆される。翻って、このような考察をすることなく恣意的にカーネル関数を使用する旧来の枠組では、そもそも得られた学習結果の良さを評価する数学的な枠組すら与えられないままに学習機械の善し悪しを判断するというナンセンスな議論を行なっている可能性を否定できないのである。一方、射影学習の枠組によって旧来の学習理論全体が理論的かつ体系的に説明されているかと言えば、必ずしもそのような状況になっているとは言えず、例えば、小川らの研究グループによる追加学習や強化学習、モデル

選択等の研究や、申請者を含む北海道大学の研究グループによる、カーネル・リッジ回帰の射影学習的解釈等、ごく限られた問題の解析手段として用いられているに過ぎないというのが現状である。

## 2. 研究の目的

以上のような背景の下、本研究において最終的に目指す目標は、射影学習の枠組、すなわち再生核ヒルベルト空間の理論を拠り所にした「機械学習理論の再編」である。その中で、本申請期間中に明らかにしようとする課題は、以下の二つに集約される。

- (1) 射影学習の枠組を基礎に「学習理論における良いカーネル関数とはどのようなものであるか?」を明らかにし、それを元に、旧来の理論を包含し得る理論的枠組を構築する。
- (2) その上で、サポートベクターマシン等、応用面での有用性が示されている一方、その理論的な背景が解明されていない既存手法に対し、理論的妥当性が保証されるための必要十分条件を与えるとともに、理論的に妥当な解釈を与える。

射影学習に関する論文の中で小川らが主張しているように、現状の学習理論のコミュニティにおいては、本来切り分けて考察すべき「何をすべきか」という情報科学の問題と「どうやって解くべきか」という情報工学の問題が混同されたまま議論されており、結果として理論的な解析が後手に回る傾向が強い。しかるに、上で述べたようなことが明らかにされれば、学習理論に対して、理論的かつ統一的な視点を与えることができると期待できる。

## 3. 研究の方法

当該研究課題は理論研究であり、必然的に目標は定理の証明となる。その実現に向けて、主に以下のような活動を行った。

- (1) 国内学会、及び、国際会議等における情報収集
- (2) 当該分野の研究を行っている他研究者との研究討論。

- (3) 計算機を用いた実験による、理論の方向性の見極め。

#### 4. 研究成果

カーネルトリックを用いた機械学習において、良好な推定結果を与えるカーネル関数とはどのようなものであるか、という問題に対して、以下のような成果を得た。

- (1) 研究背景において述べたように、機械学習におけるカーネル関数の役割は、未知推定対象が属する関数空間(再生核ヒルベルト空間)を規定することである。しかしながら、未知推定対象がどのような再生核ヒルベルト空間に属しているかは一般的に未知であり、このことは、学習の最適性を保証する上で大きな障害となっていた。この問題に対し、極力広範な未知推定対象に対して学習の最適性を保証すべく、広い再生核ヒルベルト空間に対応するカーネル関数を構築する理論を与えた。具体的には、パラメータを有するカーネル関数の族が、当該パラメータに関してある種の単調性を有するならば、そのパラメータに関して積分をすることにより、積分区間に属する任意のパラメータを用いたカーネルに対応する再生核ヒルベルト空間全てを包含する再生核ヒルベルト空間を構築できることを理論的に証明した。
- (2) 前項において、広範な未知推定対象に対して機械学習の最適性を保証すべく、広い再生核ヒルベルト空間を構成する方法を与えた。ここで言う最適性とは、カーネル関数と既知の訓練データが規定する解空間への直交射影が得られるという意味での最適性を意味する。一方で、未知推定対象を含む再生核ヒルベルト空間が複数あった場合に、どれに対応するカーネル関数を用いた場合に、当該直交射影による解が最も真値に近くなるか、という問題が残る。この問題に対し、不変な計量を有する再生核ヒルベルト空間に対応するカーネル関数の族の中で最適な直交射影を与えるものは、未知推定対象を含む最小の再生核ヒルベルト空間に対応するカーネル関数であることを理論的に証明した。
- (3) 上記二項目において、機械学習におけるカーネル関数の役割に関する理論的な解析を行ない、最適な学習結果を得るための条件等を明らかにした。一方、具体的にカーネル関数が規定する再生核ヒルベルト空間がどのような性質を有するかについての解析は十分とは言えな

かった。それに対し、カーネル関数は、対応する再生核ヒルベルト空間に属する未知推定対象関数の、任意の二入力における関数値の相関構造を規定していると解釈できることを明らかにした。

カーネル関数を用いた学習には、カーネル関数自身と既知の入力データから決まるグラム行列と呼ばれる非負定値行列が重要な役割を担う。この扱いには、線形代数の多くの知見を利用することが可能である。この解析に直接、及び、間接的に利用可能な知見として、例えば、画像信号処理や音響信号処理等、線形代数に基づく様々な信号処理法の開発及び解析等を行った。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 10 件)

- ① A. Tanaka, H. Imai, M. Kudo, M. Miyakoshi, "Optimal Kernel in a Class of Kernels with an Invariant Metric", Lecture Notes in Computer Science, Structural, Syntactical and Statistical Pattern Recognition, LNCS5342, pp. 530-539, 2008 (査読有)
- ② 田中章, 三佐川祐輔, 宮腰政明, 「同時対角化行列の摂動解析と二次統計量 BSS への応用」, 電子情報通信学会論文誌 A, Vol. J91-A, No. 11, pp. 1093-1097, 2008 (査読有)
- ③ 今井雄基, 田中章, 宮腰政明, 「相関行列差分の同時対角化による Noisy BSS における相関行列選択」, 電子情報通信学会技術研究報告, 応用音響, Vol. 107, No. 532, EA2007-127, pp. 91-95, 2008 (査読無)
- ④ A. Tanaka, M. Miyakoshi, "Fast Parameter Selection Algorithm for Linear Parametric Filters", IEICE Transactions on Fundamentals, Vol. E90-A, No. 12, pp. 2952-2956, 2007 (査読有)
- ⑤ 田中章, 宮腰政明, 「線形推定理論に基づく固有空間 BPLP 法の改善」, 電子情報通信学会論文誌 D, Vol. J90-D, No. 10, pp. 2840-2847, 2007 (査読有)
- ⑥ A. Tanaka, H. Imai, M. Kudo, M. Miyakoshi, "Integrated Kernels and Their Properties", Pattern Recognition, Vol. 40, pp. 2930-2938, 2007 (査読有)
- ⑦ 田中章, 宮腰政明, 「高次統計量に基づく混合比推定による Blind-MINT 法の拡

張」, 電子情報通信学会技術研究報告, 応用音響, Vol.107, No.120, EA2007-28, pp.7-12, 2007 (査読無)

- ⑧ A. Tanaka, H. Imai, M. Miyakoshi, "A Unified Framework of Subspace Identification for D.O.A. Estimation", IEICE Transactions on Fundamentals, Vol.E90-A, No.2, pp.419-428, 2007 (査読有)
- ⑨ A. Tanaka, M. Sugiyama, H. Imai, M. Kudo, M. Miyakoshi, "Model Selection Using a Class of Kernels with an Invariant Metric", Lecture Notes in Computer Science, Structural, Syntactical and Statistical Pattern Recognition, LNCS4109, pp.862-870, 2006 (査読有)
- ⑩ 田中章, 今井英幸, 宮腰政明, 「線形制約の一般解によるパラメトリック部分射影フィルタの解釈とアフィン制約付き復元問題への応用」, 電子情報通信学会論文誌 A, Vol. J89-A, No. 8, pp.679-681, 2006 (査読有)

[学会発表] (計 16 件)

- ① A. Tanaka, M. Miyakoshi, "Joint Estimation of Signal and Noise Correlation Matrices and Its Application to Inverse Filtering", 2009 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP2009), Taipei, Taiwan (2009/4/21)
- ② 田中章, 宮腰政明, 「一般標本化定理における最適再生核の数理」, 日本音響学会 2009 年春季研究発表会, 東京 (2009/3/19)
- ③ A. Tanaka, K. Azuma, M. Miyakoshi, "GCD-Based Blind Deconvolution Using PCA-Based Noise Reduction", The 6th IASTED International Conference on Signal Processing, Pattern Recognition and Applications (SPPRA2009), Innsbruck, Austria (2009/2/18)
- ④ 今井雄基, 田中章, 宮腰政明, 「相関行列差分に基づく Noisy BSS の有効性に関する一検証」, 日本音響学会 2008 年秋季研究発表会, 福岡 (2008/9/12)
- ⑤ 田中和樹, 田中章, 宮腰政明, 小野順貴, 「等方的雑音共分散行列の対称分解に基づくブラインド無相関化の検討」, 日本音響学会 2008 年秋季研究発表会, 福岡 (2008/9/12)
- ⑥ 東克憲, 田中章, 宮腰政明, 「主成分分析による雑音抑制を用いた GCD に基づくブラインドデコンボリューション」, 日

本音響学会 2008 年秋季研究発表会, 福岡 (2008/9/12)

- ⑦ 赤平浩規, 田中章, 宮腰政明, 「固有空間 BPLP 法における固有空間の最適次元について」, 第 7 回情報科学技術フォーラム, 藤沢 (2008/9/4)
- ⑧ A. Tanaka, H. Imai, M. Miyakoshi, "Noisy BSS Based on Joint Diagonalization of Differences of Correlation Matrices", The 10th IASTED International Conference on Signal and Image Processing (SIP 2008), Kailua-Kona, Hawaii, USA (2008/8/19)
- ⑨ A. Tanaka, H. Imai, J. Toyama, M. Kudo, M. Miyakoshi, "Wiener Implementation of Kernel Machines", The Fifth IASTED International Conference on Signal Processing, Pattern Recognition, and Applications (SPPRA2008), Innsbruck, Austria (2008/2/13)
- ⑩ 田中章, 宮腰政明, 「相関行列差分の同時対角化に基づく Noisy BSS」, 日本音響学会 2007 年秋季研究発表会, 甲府 (2007/9/19)
- ⑪ 三佐川祐輔, 田中章, 宮腰政明, 「相関行列選択に基づく二次統計量 BSS の数理的性質」, 日本音響学会 2007 年秋季研究発表会, 甲府 (2007/9/19)
- ⑫ A. Tanaka, H. Imai, M. Miyakoshi, "Selection of Correlation Matrices for Second-Order-Statistics-Based Blind Source Separation", IEEE Statistical Signal Processing Workshop 2007 (SSP2007), Madison, WI, USA (2007/8/27)
- ⑬ 田中章, 今井英幸, 宮腰政明, 「二次統計量に基づく BSS における相関行列選択」, 日本音響学会 2007 年春季研究発表会, 東京 (2007/3/14)
- ⑭ 田中章, 今井英幸, 宮腰政明, 「二次統計量に基づく BSS のための定常雑音分散推定に関する一考察」, 日本音響学会 2006 年秋季研究発表会, 金沢 (2006/9/13)
- ⑮ A. Tanaka, H. Imai, M. Miyakoshi, "Second-Order-Statistics-Based Blind Source Separation for Non-Stationary Sources with Stationary Noise", The 6th IEEE International Symposium on Signal Processing and Information Technology (ISSPIT2006), Vancouver, Canada (2006/8/30)
- ⑯ A. Tanaka, H. Imai, M. Miyakoshi, "Theoretical Foundations of Second-Order-Statistics-Based Blind Source Separation for Non-Stationary Sources", 2006 IEEE International

Conference on Acoustics, Speech, and  
Signal Processing (ICASSP2006),  
Toulouse, France (2006/5/18)

6. 研究組織

(1) 研究代表者

田中 章 (TANAKA AKIRA)

北海道大学・大学院情報科学研究科・助教  
研究者番号：20332471

(2) 研究分担者

なし

(3) 連携研究者

なし