正定値行列の一般化平均 –色認知空間上の楕円予測–

統計数理研究所 数理・推論研究系　江口 真透
マツダ株式会社 車両開発本部 車両実研部　中本 尊元
長崎大学 情報系新学部創設準備室　西井 龍映

1. 正定値行列の回帰モデル

多様体の空間上のデータ解析が盛んになっている cf. Patrangenaru-Ellingson (2016). ここでは，p 次正定値行列空間 $\mathcal{P}$ 上の一般化平均を利用したデータ解析を紹介する．説明変数 $\boldsymbol{X}$ を p 次元ベクトル，被説明変数 $\mathbf{P}$ を p 次正定値行列とするノンパラメトリック回帰モデルについて考えよう cf. Petersen-Müller (2019). データ $\{(\boldsymbol{X}_i, \mathbf{P}_i) : 1 \le i \le n\}$ が得られたとき，新たに $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}$ が与えられたときナダラヤ・ワトソン型の $\mathbf{P}$ の予測子を一般化平均（Nagumo,1930; Kolmogorov, 1930）を使って

$$\hat{\mathbf{P}}_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{x}, h) = \boldsymbol{\phi}^{-1}\big(\sum_{i=1}^{n} \hat{\pi}_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{\phi}(\mathbf{P}_i)\big) \tag{1}$$

と提案する．ここで $\hat{\pi}_h(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) = g_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i, \mathbf{P}_i)/\sum_j g_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_j, \mathbf{P}_j)$, ただし $g_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma})$ は平均 $\boldsymbol{\mu}$, 分散 $h\boldsymbol{\Sigma}$ の正規密度関数とする．また，正定値行列 $\mathbf{G}$ に対して写像 $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{G})$ を

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{G}) = \mathbf{O}\,\mathrm{diag}\big[\phi(\lambda_1), \cdots, \phi(\lambda_p)\big]\mathbf{O}^\top$$

と定める．ここで $\mathbf{O}$ は $\mathbf{G}$ の固有ベクトルからなる直交行列，$\lambda_1, \cdots, \lambda_p$ は $\mathbf{G}$ の固有値，$\phi(s)$ は $s > 0$ で定義された単調関数とする．例えば，$\phi(s)$ として $s, s^{-1}, \log s$ を取るとき，算術平均，調和平均，幾何平均による

$$\hat{\mathbf{P}}_{\mathrm{A}}(\boldsymbol{x}, h) = \textstyle\sum_i \hat{\pi}_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\mathbf{P}_i,\ \hat{\mathbf{P}}_{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}, h) = \big(\sum_i \hat{\pi}_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\mathbf{P}_i^{-1}\big)^{-1},\ \hat{\mathbf{P}}_{\mathrm{G}}(\boldsymbol{x}, h) = \exp(\sum_i \hat{\pi}_h(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}_i)\log \mathbf{P}_i)$$

が導かれる．

正定値行列空間 $\mathcal{P}$ 上のブレグマン・ダイバージェンス $D_{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{G}, \mathbf{H}) = \mathrm{tr}\{\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{G}) - \boldsymbol{\Phi}(\mathbf{H}) - \boldsymbol{\phi}(\mathbf{G})(\mathbf{G} - \mathbf{H})\}$ を考える，cf. Bregman (1967). ここで $\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{G})$ は上の $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{G})$ と同様に定義された写像とする．ただし，生成関数 Φ は $\Phi'(s) = \phi(s)$ とする．これによるロス関数を

$$\hat{L}_{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{G}, \boldsymbol{x}, h) = \sum_{i=1}^{n} \hat{\pi}_h(\boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{x}) D_{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{G}, \mathbf{P}_i) \tag{2}$$

と定義する．このとき，次の命題が成立する．

命題 1. (1) で定義された予測子 $\hat{\mathbf{P}}_{\boldsymbol{\phi}}$ は (2) のロス関数 $\hat{L}_{\boldsymbol{\phi}}$ を最小にする:

$$\hat{\mathbf{P}}_{\boldsymbol{\phi}}(\boldsymbol{x}, h) = \underset{\mathbf{G}\in\mathcal{P}}{\mathrm{argmin}}\,\hat{L}_{\boldsymbol{\phi}}(\mathbf{G}, \boldsymbol{x}, h).$$

例えば，$\phi(s) = s^{-1}$ を取れば D_ϕ は KL ダイバージェンス，予測子は調和平均による $\hat{\mathbf{P}}_{\mathrm{H}}$ が帰着される．

2. 色度認知問題の予測

色認知空間において，ある色を 3 次元の点 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{x}_i$ で与えたとき，その色の人間の識別不能な色の領域を $\boldsymbol{x}_i$ を中心にする楕円体：

$$\mathcal{E}(\boldsymbol{x}_i, \mathbf{P}_i) = \{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^3 : (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i)^\top \mathbf{P}_i(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_i) \le r^2\}$$

で近似したデータがデュポン社から公開されている cf. Melgosa et al. (1997). このデータ $\{(\boldsymbol{x}_i, \mathbf{P}_i) : 1 \le i \le 19\}$ をトレーニングデータとして，色座標 $\boldsymbol{x}$ の識別不能領域を表す 3 次正定値行列 $\mathbf{P}$ を上で提案した予測子 (1) で求めた，cf. Nakamoto et al. (2019). しかし，適切なバンド幅 h はまだ決められてない．ここでは，交差検証法による

$$\hat{h} = \underset{h>0}{\mathrm{argmin}} \sum_{i=1}^{19} D_{\mathrm{R}}(\hat{\mathbf{P}}_{\boldsymbol{\phi}}^{(-i)}(\boldsymbol{x}_i, h), \mathbf{P}_i)$$

を採用した．ここで $\hat{\mathbf{P}}_{\boldsymbol{\phi}}^{(-i)}(\boldsymbol{x}, h)$ は i 番目の $(\boldsymbol{x}_i, \mathbf{P}_i)$ を除いて残ったデータに対して (1) によって求めたともの する．$D_{\mathrm{R}}(\mathbf{G}, \mathbf{H})$ は合同不偏性を持つリーマン 2 乗距離を表す cf. Cartan (1927).