

カーネル法によるマルコフ連鎖の遷移行列の固有値解析

統計数理研究所 伊庭幸人

機械学習などで近年用いられている再生カーネルに基づく手法を高野・宮下の緩和モード解析に導入する試みについて話した。

緩和モード解析

高野と宮下は、文献 [1] で、データから背後にある高次元のマルコフ連鎖の固有値と固有ベクトル（緩和モード）を推定する方法を提案した。この方法では、固有ベクトルに対してパラメータを含んだ形を仮定し、時間遅れ相関を含んだ一般化固有値問題を解くことで、遷移行列の要素を推定せずに、遅いモードに対応する少数の固有値および固有ベクトルを推定するという点に特徴がある。ランダムスピン系、ポリマー、タンパクなどのシミュレーションデータの解析への応用が行われている。

カーネル法

線形の変量解析手法を非線形化する一般的な手法として再生カーネルを用いる手法がある [2, 3]。SVM(サポートベクターマシン) がよく知られているが、それ以外にも、PCA に対するカーネル PCA, CCA に対するカーネル CCA などさまざまな応用がある。カーネル CCA をカオス振動子間の複雑な同期現象の解析に応用した例については [4] を参照。

今回の内容

今回は上の2つを結びつけて、高野・宮下法をカーネル化する試みについて述べ、いくつかの計算例を示した。この内容は、さらに例を追加して、日本物理学会 (2008年3月, 近畿大学) でも発表した (講演番号 26pWF-1)。

- [1] H. Takano and S. Miyashita (1995): Relaxation Modes in Random Spin Systems J. Phys. Soc. Jpn., **64** 3688-3698.
- [2] B. Scholkopf, A. J. Smola (2001): Learning With Kernels: Support Vector Machines, Regularization, Optimization and Beyond, MIT Press.
- [3] J. Shawe-Taylor, N. Cristianini (2004): Kernel Methods for Pattern Analysis, Cambridge University Press.
- [4] H. Suetani, Y. Iba and K. Aihara (2006): Detecting generalized synchronization between chaotic signals: a kernel-based approach, Journal of Physics A: Math. Gen. **39** 10723-10742.