6.13

(6.33) $k(x, x') = g(\theta, x)^T F^{-1} g(\theta, x')$

(6.34) $F = E_x[g(\theta, x) g(\theta, x)^T]$

(6.32) $g(\theta, x) = \nabla_\theta \ln p(x|\theta)$

変数変換 $\theta \to \psi(\theta)$ 但し $\psi(\cdot)$ は可逆で微分可能

(微分演算子の変数変換について)

θ は2次、ψ も2次とすると

$$\nabla_\theta = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_1}\frac{\partial}{\partial \psi_1} + \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_1}\frac{\partial}{\partial \psi_2} \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_2}\frac{\partial}{\partial \psi_1} + \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_2}\frac{\partial}{\partial \psi_2} \end{pmatrix}$$

である。

(実験)

2次元のガウス分布を考える。

$p(x|\mu) = N(x|\mu, I) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-\frac{1}{2}(x-\mu)^2\}$

$\ln p(x|\mu) = -\frac{1}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}(x-\mu)^2 = -\frac{1}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}\{(x_1-\mu_1)^2 + (x_2-\mu_2)^2\}$

$g(\mu, x) = \nabla_\mu \ln p(x|\mu) = (\frac{\partial}{\partial\mu_1}\ln p(x|\mu), \frac{\partial}{\partial\mu_2}\ln p(x|\mu))$

$= (x_1-\mu_1, x_2-\mu_2) = x-\mu$

$F = E_x[(x-\mu)^2] = I \leftarrow (x-\mu)^2$の期待値なので分散に等しい

$k(x, x') = g(\mu, x)^T F^{-1} g(\mu, x') = (x-\mu)^T(x'-\mu)$

(変数変換してみる)

$\psi = \begin{pmatrix}\psi_1 \\ \psi_2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\mu_1^2 \\ \mu_2^2\end{pmatrix}$

$p(x|\mu) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\{-\frac{1}{2}(x - \begin{pmatrix}\psi_1^{\frac{1}{2}} \\ \psi_2^{\frac{1}{2}}\end{pmatrix})^2\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp[-\frac{1}{2}\{(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})^2 + (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})^2\}] = p(x|\psi)$

$\ln p(x|\psi) = -\frac{1}{2}\ln 2\pi - \frac{1}{2}\{(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})^2 + (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})^2\}$

$\frac{\partial}{\partial\psi_1}\ln p(x|\psi) = -\frac{1}{2}\cdot 2(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})(-1)\frac{1}{2}\psi_1^{-\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}}$

$\frac{\partial}{\partial\psi_2}\ln p(x|\psi) = \frac{1}{2}(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}}$

$\frac{\partial\psi_1}{\partial\mu_1} = 2\mu_1 = 2\psi_1^{\frac{1}{2}}$, $\frac{\partial\psi_2}{\partial\mu_1} = 0$, $\frac{\partial\psi_1}{\partial\mu_2} = 0$, $\frac{\partial\psi_2}{\partial\mu_2} = 2\psi_2^{\frac{1}{2}}$

よって

$$g(\theta, x) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \mu_1}\frac{\partial}{\partial \psi_1}\ln p(x|\psi) + \frac{\partial \psi_2}{\partial \mu_1}\frac{\partial}{\partial \psi_2}\ln p(x|\psi) \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial \mu_2}\frac{\partial}{\partial \psi_1}\ln p(x|\psi) + \frac{\partial \psi_2}{\partial \mu_2}\frac{\partial}{\partial \psi_2}\ln p(x|\psi) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 2\psi_1^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}} \\ 2\psi_2^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2}(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}}) \\ (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}}) \end{pmatrix} = g(\psi, x)$$

$$F = E_x[g(\theta,x)\, g(\theta,x)^T] =$$

$$= \int g(\theta,x)\, g(\theta,x)\, p(x|\theta)\, dx = \int g(\psi,x)\, g(\psi,x)^T p(x|\psi)\, dx$$

$$= \underbrace{\int \begin{pmatrix} (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})^2 & (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}}) \\ (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}}) & (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})^2 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\{(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})^2+(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})^2\}\right] dx}_{\text{平均が}(\psi_1^{\frac{1}{2}},\psi_2^{\frac{1}{2}})\text{のガウス分布の共分散の期待値になっている}}$$

$$= I$$

よって

$$k(x,x') = g(\theta,x)^T F^{-1} g(\theta,x) = (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})(x_1'-\psi_1^{\frac{1}{2}}) + (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})(x_2'-\psi_2^{\frac{1}{2}}) \cdots ①$$

となる。

一方 $p(x|\psi)$ のフィッシャーカーネル $l(x,x')$ は

$$p(x|\psi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\{(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})^2+(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})^2\}\right]$$

$$\nabla_\psi \ln p(x|\psi) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}} \\ \frac{1}{2}(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \psi_1^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & \psi_2^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}}) \\ (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}}) \end{pmatrix}$$

$$G = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \psi_1^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & \psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \underbrace{\int \begin{pmatrix} x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}} \\ x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}} \end{pmatrix}(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}},\ x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\{(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})^2+(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})^2\}\right] dx}_{\text{ガウス分布の共分散になっているので}} \begin{pmatrix} \psi_1^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & \psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}^T$$

$$= \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \psi_1^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & \psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \psi_1^{-\frac{1}{2}} & 0 \\ 0 & \psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}^T = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} \psi_1^{-1} & 0 \\ 0 & \psi_2^{-1} \end{pmatrix}$$

よって

$$G^{-1} = 4\begin{pmatrix} \psi_1 & 0 \\ 0 & \psi_2 \end{pmatrix}$$

$$l(x,x') = \nabla_\psi \ln p(x|\psi)^T \cdot 4 \cdot \begin{pmatrix} \psi_1 & 0 \\ 0 & \psi_2 \end{pmatrix} \nabla_\psi \ln p(x'|\psi)$$

$$= \left(\tfrac{1}{2}(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}},\ \tfrac{1}{2}(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}}\right) \cdot 4\begin{pmatrix} \psi_1 & 0 \\ 0 & \psi_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tfrac{1}{2}(x_1'-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}} \\ \tfrac{1}{2}(x_2'-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}} \end{pmatrix}$$

$$= 4\cdot\tfrac{1}{2}(x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}}\cdot\psi_1\cdot\tfrac{1}{2}(x_1'-\psi_1^{\frac{1}{2}})\psi_1^{-\frac{1}{2}} + 4\cdot\tfrac{1}{2}(x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}}\cdot\psi_2\cdot\tfrac{1}{2}(x_2'-\psi_2^{\frac{1}{2}})\psi_2^{-\frac{1}{2}}$$

$$= (x_1-\psi_1^{\frac{1}{2}})(x_1'-\psi_1^{\frac{1}{2}}) + (x_2-\psi_2^{\frac{1}{2}})(x_2'-\psi_2^{\frac{1}{2}}) \cdots ②$$

①, ② より

$$k(x,x') = l(x,x')$$

よって $k(x,x')$ の値と $\theta \to \psi(\theta)$ と主な変換した $p(x|\psi)$ についての $l(x,x')$ の値が等しい

即ち $\theta \to \psi(\theta)$ の主な変換においてフィッシャーカーネルは不変である

(解答)

θ, ψ が2次の場合について考える

$$\begin{cases} \psi_1 = \psi_1(\theta_1) \\ \psi_2 = \psi_2(\theta_2) \end{cases}$$

という変数変換をする。

また

$$\begin{cases} \theta_1 = \psi_1^{-1}(\psi_1) \\ \theta_2 = \psi_2^{-1}(\psi_2) \end{cases}$$

と逆変換できるとする。

・$p(x|\theta)$ の θ を ψ に変換すると

$$p(x|\theta) = p(x|\theta_1, \theta_2) = p(x|\psi_1^{-1}(\psi_1), \psi_2^{-1}(\psi_2)) = p(x|\psi)$$

となる。

・このとき $g(\theta, x)$ は

$$g(\theta, x) = \nabla_\theta \ln p(x|\theta) = \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_1}\frac{\partial}{\partial \psi_1}\ln p(x|\psi) + \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_1}\frac{\partial}{\partial \psi_2}\ln p(x|\psi) \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_2}\frac{\partial}{\partial \psi_1}\ln p(x|\psi) + \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_2}\frac{\partial}{\partial \psi_2}\ln p(x|\psi) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_1} & \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_1} \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_2} & \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \psi_1}\ln p(x|\psi) \\ \frac{\partial}{\partial \psi_2}\ln p(x|\psi) \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_1} & \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_1} \\ \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta_2} & \frac{\partial \psi_2}{\partial \theta_2} \end{pmatrix} \nabla_\psi \ln p(x|\psi) = g(\psi, x)$$

となる。これを $g(\psi, x)$ とおく。

・このときFは

$$F = E_x[g(\theta,x)g(\theta,x)^T] = \int g(\theta,x)g(\theta,x)^T p(x|\theta)dx$$

$$= \int g(\psi,x)g(\psi,x)^T p(x|\psi)dx$$

$$= \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix} \int \nabla_\psi \ln p(x|\psi)\{\nabla_\psi \ln p(x|\psi)\}^T p(x|\psi)dx \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix}^T$$

となる。これより

$$F^{-1} = \left\{\begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix}^T\right\}^{-1} \left\{\int \nabla_\psi \ln p(x|\psi)\{\nabla_\psi \ln p(x|\psi)\}^T p(x|\psi)dx\right\}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix}^{-1}$$

を得る。

・このとき $k(x,x')$ は

$$k(x,x') = g(\theta,x)^T F^{-1} g(\theta,x') = \nabla_\theta \ln p(x|\theta)^T \left\{\int \nabla_\theta \ln p(x|\theta)\{\nabla_\theta \ln p(x|\theta)\}^T p(x|\theta)dx\right\}^{-1} \nabla_\theta \ln p(x'|\theta)$$

$$= \nabla_\psi \ln p(x|\psi)^T \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix}^T \left\{\begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix}^T\right\}^{-1} \left\{\int \nabla_\psi \ln p(x|\psi)\{\nabla_\psi \ln p(x|\psi)\}^T p(x|\psi)dx\right\}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_1} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_1} \\ \frac{\partial\psi_1}{\partial\theta_2} & \frac{\partial\psi_2}{\partial\theta_2} \end{pmatrix} \nabla_\psi \ln p(x'|\psi)$$

$$= \nabla_\psi \ln p(x|\psi)^T \left\{\int \nabla_\psi \ln p(x|\psi)\{\nabla_\psi \ln p(x|\psi)\}^T p(x|\psi)dx\right\}^{-1} \nabla_\psi \ln p(x'|\psi) \quad \cdots ①$$

ここで $p(x|\psi)$ のフィッシャースコアを $h(\psi,x)$，フィッシャー情報量行列をG、フィッシャーカーネルを $l(x,x')$ とすると

$$h(\psi,x) = \nabla_\psi \ln p(x|\psi)$$

$$G = \int h(\psi,x)h(\psi,x)^T p(x|\psi)dx$$

$$l(x,x') = h(\psi,x)^T G^{-1} h(\psi,x') = \nabla_\psi \ln p(x|\psi)^T \left\{\int \nabla_\psi \ln p(x|\psi)\{\nabla_\psi \ln p(x|\psi)\}^T p(x|\psi)dx\right\}^{-1} \nabla_\psi \ln p(x'|\psi) \cdots ②$$

よって $k(x,x') = l(x,x')$ を得る

よって $\theta \to \psi(\theta)$ と置換したときフィッシャーカーネルは不変である。