

■ 目 次

■ シリーズの刊行にあたって	iii
■ まえがき	v

Chapter 1

第 1 章 導入：関係データ解析とは	1
1.1 統計的機械学習	1
1.1.1 データからの学習	1
1.1.2 教師有り学習と教師無し学習	2
1.2 関係データとは	3
1.3 関係データの表現	6
1.3.1 関係データのグラフ表現	6
1.3.2 関係データの行列（多次元配列）表現	8
1.3.3 関係の値の表現	9
1.4 関係データの種類	11
1.4.1 有向関係データと無向関係データ	11
1.4.2 単一ドメインと複数ドメイン	12
1.4.3 対称関係データと非対称関係データ	14
1.4.4 2項関係と多項関係	14
1.5 関係データ解析	15
1.5.1 予測	16
1.5.2 知識抽出	17
1.5.3 本書のアプローチ：低次元構造をとらえる	19
1.6 本書の目的と構成	21

Chapter 2

第 2 章 対称関係データのクラスタリング技術：スペクトラルクラスタリング	23
2.1 関係データのクラスタリングとは	23
2.2 対称関係データのオブジェクトクラスタリング法：スペクトラルクラスタリング	25
2.2.1 コミュニティ検出と密結合グラフ	25
2.2.2 グラフカット	26
2.2.3 スペクトラルクラスタリング	27
2.3 非正規化グラフラブラシアンによるスペクトラルクラスタリング	29
2.3.1 入力と出力	29
2.3.2 次数行列とグラフラブラシアン	30
2.3.3 固有値分解によるクラスタ抽出	32
2.3.4 クラスタ割り当て Z の計算	34

2.3.5	まとめ：アルゴリズム	35
2.4	正規化グラフラブラシアンによるスペクトラルクラスタリング	36
2.4.1	正規化カットとスペクトラルクラスタリングアルゴリズムとの関係	36
2.4.2	対称正規化グラフラブラシアンに基づくスペクトラルクラスタリング	37
2.4.3	酔歩正規化グラフラブラシアンに基づくスペクトラルクラスタリング	38
2.5	実データへの適用例	40
2.6	実運用上の留意点と参考文献	42
2.6.1	どのアルゴリズムを選択するか	42
2.6.2	K の設定方法	43
2.6.3	参考文献について	43
2.6.4	スペクトラルクラスタリングの限界と密結合クラスタリングの現状	44

第 3 章	非対称関係データのクラスタリング技術：確率的 ブロックモデルと無限関係モデル	45
3.1	非対称関係データの確率的「ブロック構造」クラスタリング	45
3.1.1	スペクトラルクラスタリングへの不満	45
3.1.2	アプローチ：ブロック構造を仮定した確率モデル	46
3.1.3	本章の対象：確率的ブロックモデルと無限関係モデル	48
3.2	確率的生成モデル	49
3.2.1	確率的生成モデルとは	49
3.2.2	確率モデルのベイズ推定	51
3.3	確率的ブロックモデル (stochastic blockmodel, SBM)	52
3.3.1	SBM の概要	53
3.3.2	SBM の定式化	54
3.3.3	SBM の推論	57
3.4	無限関係モデル (infinite relational model, IRM)	66
3.4.1	IRM の概要	66
3.4.2	IRM の定式化	67
3.4.3	IRM の推論	70
3.4.4	出力方法	75
3.5	IRM のまとめ	78
3.6	実データへの適用例	81
3.7	実運用上の留意点と参考文献	83
3.7.1	どのアルゴリズムを使うべきか	83
3.7.2	IRM の限界と拡張	84
3.7.3	参考文献について	85

第 4 章	行列分解	87
4.1	準備	87
4.2	単純行列分解	89
4.2.1	目的関数	92
4.2.2	最適化	93

4.2.3	類似度としての解釈	94
4.3	さまざまな行列分解	95
4.3.1	ℓ^2 正則化行列分解	95
4.3.2	非負行列分解	96
4.4	アルゴリズム	99
4.4.1	1 次交互勾配降下法	99
4.4.2	疑似 2 次交互勾配降下法	102
4.4.3	制約つきの最適化	106
4.4.4	確率勾配降下法	108
4.5	欠損値がある場合の行列分解	112
4.5.1	欠損値を除外	113
4.5.2	欠損値を補完	113
4.6	関連する話題	114
4.6.1	確率モデルとしての解釈	115
4.6.2	非線形モデルへの拡張	116
4.6.3	R の決めかた	117
4.6.4	実データ	117

Chapter 5	第 5 章 高次関係データとテンソル	119
5.1	用語の定義	119
5.2	テンソルにおける線形演算	121
5.2.1	加算, スカラ倍, 内積	122
5.2.2	モード積	122
5.2.3	スライス	125
5.2.4	外積	127
5.3	行列演算への変換	127
5.3.1	ベクトル化作用素とクロネッカー積	128
5.3.2	モード積, 外積, 内積	128
5.3.3	計算量の注意	129
5.3.4	テンソル演算の式展開のコツ	130

Chapter 6	第 6 章 テンソル分解	133
6.1	テンソルの次元圧縮	133
6.2	CP 分解	136
6.2.1	動機	136
6.2.2	目的関数	137
6.2.3	アルゴリズム	138
6.3	タッカー分解	142
6.3.1	動機	142
6.3.2	目的関数	144
6.3.3	アルゴリズム	145
6.4	CP 分解とタッカー分解の違い	148

6.4.1	類似度としての解釈	148
6.5	補足	152
6.5.1	実応用例	152
6.5.2	さまざまな最適化と学習アルゴリズム	152
6.5.3	2 次の交互作用のみからなる分解	153
6.5.4	複数のテンソルや行列が与えられた場合	154
6.5.5	その他のテンソル分解	154
■	参考文献	155
■	索引	165