提出課題 II：線形回帰モデル

問題文中の空欄に入る数式を選択，または数値を計算せよ．選択した解答 ((A)–(D))，または計算した数値は「機械学習 2024 KA240201-teams」の「一般」チャネルに出現する課題へのリンクから提出すること．

問題 1, 2

次の形のロジスティックシグモイド関数の線形結合

$$y(x, \mathbf{w}) = w_0 + \sum_{j=1}^{M} w_j \sigma\left(\frac{x - \mu_j}{s}\right) \tag{a}$$

は次の形の tanh 関数の線形結合

$$y(x, \mathbf{u}) = u_0 + \sum_{j=1}^{M} u_j \tanh\left(\frac{x - \mu_j}{s}\right)$$

と等価であることを示し，新しいパラメータ $u_1, \ldots, u_M$ ともとのパラメータ $w_1, \ldots, w_M$ を関係付ける式を求める．

$a_j = (x - \mu_j)/2s$ とすると，式 (a) は

$$\begin{aligned} y(x, \mathbf{w}) &= w_0 + \sum_{j=1}^{M} \frac{w_j}{2}(\boxed{\quad(1)\quad} + 1) \\ &= u_0 + \sum_{j=1}^{M} u_j \tanh(a_j) \end{aligned}$$

と書き換えることができる．ただし，$u_j = w_j/2$ $(j = 1, \ldots, M)$ であり，$u_0 = \boxed{\quad(2)\quad}$ である．

問題 1. 空欄 (1) に入る数式を選択せよ．

(A) $\sigma(a_j) - 1$

(B) $\sigma(2a_j) - 1$

(C) $2\sigma(a_j) - 1$

(D) $2\sigma(2a_j) - 1$

問題 2. 空欄 (2) に入る数式を選択せよ．

(A) $w_0/2$

(B) w_0

(C) $w_0 + \sum_{j=1}^{M} w_j$

(D) $w_0 + \sum_{j=1}^{M} w_j/2$

問題 3, 4

ガウス分布に従う複数の目標変数 $\mathbf{t}$ をもつ次の形の線形基底関数モデルを考える．

$$p(\mathbf{t}|\mathbf{W}, \mathbf{\Sigma}) = \mathcal{N}(\mathbf{t}|\mathbf{y}(\mathbf{x}, \mathbf{W}), \mathbf{\Sigma}).$$

ただし，

$$\mathbf{y}(\mathbf{x}, \mathbf{W}) = \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x})$$

である．入力基底ベクトル $\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)$ $(n = 1, \ldots, N)$ とそれに対応する目標ベクトル $\mathbf{t}_n$ が訓練データ集合として与えられるとき，パラメータ行列 $\mathbf{W}$ の最尤推定解 $\mathbf{W}_{\mathrm{ML}}$ を求める．

まず対数尤度関数は以下のように書き下すことができる．

$$\ln L(\mathbf{W}, \mathbf{\Sigma}) = -\frac{N}{2}\ln|\mathbf{\Sigma}| - \frac{1}{2}\left(\mathbf{t}_n - \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)\right)^{\mathrm{T}}\mathbf{\Sigma}^{-1}\left(\mathbf{t}_n - \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)\right)$$

はじめに，$\mathbf{W}$ についての微分を 0 とおくと，

$$0 = \boxed{\quad (3) \quad}.$$

となる．$\mathbf{\Sigma}$ をかけ，計画行列 $\mathbf{\Phi}$ と訓練データ行列 $\mathbf{T}$ を導入すると，

$$\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}\mathbf{W} = \mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}.$$

となり，$\mathbf{W}$ について解くと，

$$\mathbf{W}_{\mathrm{ML}} = \boxed{\quad (4) \quad}.$$

が得られる．

問題 3. 空欄 (3) に入る数式を選択せよ．

(A) $-\sum_{n=1}^{N}\mathbf{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)(\mathbf{t}_n - \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n))$

(B) $-\sum_{n=1}^{N}\mathbf{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)^{\mathrm{T}}(\mathbf{t}_n - \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n))$

(C) $-\sum_{n=1}^{N}\mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{t}_n - \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n))\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)$

(D) $-\sum_{n=1}^{N}\mathbf{\Sigma}^{-1}(\mathbf{t}_n - \mathbf{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n))\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_n)^{\mathrm{T}}$

問題 4. 空欄 (4) に入る数式を選択せよ．

(A) $\left(\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}\right)^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}$

(B) $\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}\left(\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}\right)^{-1}$

(C) $\left(\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}\right)^{-1}\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}$

(D) $\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{\Phi}\left(\mathbf{\Phi}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}\right)^{-1}$

問題 5

入力データ集合を $\{1, 2, 3, 4, 5\}$，対応する目標データ集合を $\{0.80, 2.45, 4.00, 6.03, 7.83\}$ とする訓練データ集合を考える．ϵ をゼロ平均のガウス分布に従うノイズとする線形回帰モデル $t = w_1 x + w_0 + \epsilon$ に対し，w_1 と w_0 の最尤解は上記の訓練データ集合を用いて求めることができる．このモデルとこれらの最尤解を用いると，新たな入力 $x_{\mathrm{new}} = 2.5$ に対する目標値 $\hat{t}$ は $\boxed{\ (5)\ }$ となる．

問題 5. 空欄 (5) に入る数値を計算せよ．