PRML の 3 章のための数学

サイボウズ・ラボ 光成滋生

2011 年 4 月 18 日

1 概要

この文章は『パターン認識と機械学習』（以下 PRML）の 3 章を理解するために必要な数学をまとめてみたものです.

いくつかの定理は証明せずに認めますが, 可能な限り self-contained であることを目指してみました. 概ね PRML に従ってますが, 違う方法をとっているところもあります.

間違い, 質問などございましたら, `herumi@nifty.com` または `twitterID:herumi` までご連絡ください.

2 最小二乗法

2.1 微分の復習

$\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ を縦ベクトルとして

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{y}.$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{y}}(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}.$$

ここで $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}$ は $\frac{\partial}{\partial x_i}$ を縦に並べた縦ベクトルとする. 2 章でも述べたが $\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}$ を ∇ と書くこともあるが PRML では場所によって縦ベクトル（3.22）だったり, 横ベクトル（3.13）だったりする. 常に縦ベクトルとしたほうが混乱は少ない.

2.2 誤差関数の最小化

$$f(\boldsymbol{w}) = \sum_{n=1}^{N} \{t_n - \boldsymbol{w}^{\boldsymbol{T}}\phi(\boldsymbol{x}_n)\}^2 + \lambda \boldsymbol{w}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{w}$$

とする. ここで $\boldsymbol{w}$ と $\phi(\boldsymbol{x}_n)$ は M 次元縦ベクトルである.

$$\Phi^{\boldsymbol{T}} = (\phi(\boldsymbol{x}_1) \cdots \phi(\boldsymbol{x}_N))$$

とおく. Φ は N 行 M 列の行列である. $f(\boldsymbol{w})$ を w で微分しよう.

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}} f(\boldsymbol{w}) = 2\sum_{n=1}^{N}\{t_n - \boldsymbol{w}^{\boldsymbol{T}}\phi(\boldsymbol{x}_n)\}(-\phi(\boldsymbol{x}_n)) + 2\lambda \boldsymbol{w}.$$

一般に縦ベクトル $\boldsymbol{x}$, $\boldsymbol{y}$ に対して

$$(\boldsymbol{x}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{y})\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{x})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}(\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\boldsymbol{T}})\boldsymbol{x}$$

だから $\boldsymbol{t} = (t_1, \ldots, t_N)^{\boldsymbol{T}}$ とおくと

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}} f(\boldsymbol{w}) &= -\sum_n t_n \phi(\boldsymbol{x}_n) + \sum_n (\phi(\boldsymbol{x}_n)\phi(\boldsymbol{x}_n)^{\boldsymbol{T}})\boldsymbol{w} + \lambda \boldsymbol{w} \\
&= -\Phi^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{t} + \Phi^{\boldsymbol{T}}\Phi\boldsymbol{w} + \lambda\boldsymbol{w} \\
&= -\Phi^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{t} + (\Phi^{\boldsymbol{T}}\Phi + \lambda I)\boldsymbol{w} = 0.
\end{aligned}$$

よって $\det(\lambda I + \Phi^{\boldsymbol{T}}\Phi) \neq 0$ のとき

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{ML}} = (\lambda I + \Phi^{\boldsymbol{T}}\Phi)^{-1}\Phi^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{t}$$

が最尤解. $\boldsymbol{y} = \Phi\boldsymbol{w}$ が予測値である.

2.3 正射影

前節で $\lambda = 0$ のときを考える.

$$\boldsymbol{y} = \Phi(\Phi^{\boldsymbol{T}}\Phi)^{-1}\Phi^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{t}$$

となる. ここでこの式の幾何学的な解釈を考えてみよう.

$\Phi = (a_1 \cdots a_M)$ と縦ベクトルの集まりで表す. $N - M$ 個のベクトル b_1, …, b_{N-M} を追加して, $\{a_1, \ldots, a_N, b_1, \ldots, b_{N-M}\}$ 全体で N 次元ベクトル空間の基底であるようにとる. その際 b_i を a_j と直交するようにとれる.

$$a_i^{\boldsymbol{T}} b_j = 0.$$

さて $X = \Phi(\Phi^{\boldsymbol{T}}\Phi)^{-1}\Phi^{\boldsymbol{T}}$ とおくと, $X\Phi = \Phi$. これは $Xa_i = a_i$ を意味する. つまり X は $a_1, \ldots, a_M$ で生成される部分空間 V=$\langle a_1, \ldots, a_M\rangle$ の点を動かさない. また b_j のとりかたから $Xb_j = 0$ も成り立つ. つまり X は部分空間 $\langle b_1, \ldots, b_{N-M}\rangle$ の点を 0 につぶす.

二つ合わせると, X は任意の点を部分空間 V 方向につぶす写像, つまり V への正射影写像と解釈できる.

式で書くと任意の点 $\boldsymbol{t}$ を $\boldsymbol{t} = \sum_i s_i a_i + \sum_i t_i b_j$ と表したとすると,

$$\boldsymbol{y} = X\boldsymbol{t} = \sum_i s_i a_i$$

となる. $\boldsymbol{t}$ から $\boldsymbol{y}$ への変換を係数だけを使って書いてみると

$$X : (s_1, \ldots, s_N, t_1, \ldots, t_{N-M}) \to (s_1, \ldots, s_N, 0, \ldots, 0).$$

これを見ると正射影のニュアンスがより明確になる.

2.4　行列での微分

x を n 次元ベクトル, A を m 行 n 列として $y = Ax$ とおく.

$$f(A) = ||y||^2 = (Ax)^{\boldsymbol{T}} Ax$$

を A で微分してみよう.

$$(Ax)^{\boldsymbol{T}} Ax = \sum_s (Ax)_s (Ax)_s = \sum_s (\sum_t a_{st} x_t)(\sum_u a_{su} x_u) = \sum_{s,t,u} x_t x_u a_{st} a_{su}.$$

よって

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial a_{ij}} f(A) &= \sum_{s,t,u} x_t x_u ((\frac{\partial}{\partial a_{ij}} a_{st}) a_{su} + a_{st} \frac{\partial}{\partial a_{ij}} a_{su}) \\
&= \sum_{s,t,u} x_t x_u (\delta_{is} \delta_{jt} a_{su} + a_{st} \delta_{is} \delta_{ju}) \\
&= (\sum_u x_j x_u a_{iu}) + (\sum_t x_t x_j a_{it}) \\
&= 2 \sum_u x_j x_u a_{iu} \\
&= 2 x_j (Ax)_i \\
&= 2 (Axx^{\boldsymbol{T}})_{ij}.
\end{aligned}$$

よって

$$\frac{\partial}{\partial A} ||Ax||^2 = 2Axx^{\boldsymbol{T}}.$$

2.5　Woodbury の逆行列の公式

行列 A, B, C, D について

$$(A + BD^{-1}C)^{-1} = A^{-1} - A^{-1}B(D + CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1}$$

が成り立つ.
（証明）

$$\begin{aligned}
A^{-1}B(D + CA^{-1}B)^{-1}CA^{-1} &= A^{-1}B((DB^{-1}A + C)A^{-1}B)^{-1}CA^{-1} \\
&= (DB^{-1}A + C)^{-1}CA^{-1} \\
&= (DB^{-1}(A + BD^{-1}C))^{-1}CA^{-1} \\
&= (A + BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1}CA^{-1}
\end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned}
\text{左辺} &= (I - (A + BD^{-1}C)^{-1}BD^{-1}C)A^{-1} \\
&= (A + BD^{-1}C)^{-1}((A + BD^{-1}C) - BD^{-1}C)A^{-1} \\
&= \text{右辺}.
\end{aligned}$$

特に, A が n 次正方行列で B を n 次縦ベクトル $\boldsymbol{x}$, $C = \boldsymbol{x^T}$, D を n 次単位行列とすると

$$(A + \boldsymbol{x}\boldsymbol{x^T})^{-1} = A^{-1} - \frac{(A^{-1}\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x^T}A^{-1})}{1 + \boldsymbol{x^T}A^{-1}\boldsymbol{x}} \tag{1}$$

が成り立つ.

2.6 正定値対称行列

n 次元実対称行列 A はある直行行列 P を用いて常に対角化可能であった.

$$P^{-1}AP = \mathrm{diag}(\lambda_1, \cdots, \lambda_n).$$

全ての固有値が正であるとき A を正定値といい, $A > 0$ とかく. 全ての固有値が正または 0 であるとき, 半正定値といい, $A \geq 0$ とかく.

任意の実ベクトル $\boldsymbol{x}$ について $\boldsymbol{y} = P\boldsymbol{x}$ とおくと $\boldsymbol{x}$ が $\mathbb{R}^n$ の全ての点をとるとき $\boldsymbol{y}$ も全ての点を渡る.

$$\boldsymbol{x^T}A\boldsymbol{x} = \sum_i \lambda_i y_i^2$$

なので $A \geq 0$ ならば $\boldsymbol{x^T}A\boldsymbol{x} \geq 0$. $A > 0$ のときは等号が成り立つのは $\boldsymbol{x} = 0$ のときのみである.

逆に任意の $\boldsymbol{x}$ について $\boldsymbol{x^T}A\boldsymbol{x} \geq 0$ とすると, $\boldsymbol{y}$ として単位ベクトル $\boldsymbol{e_i}$ を考えれば $\lambda_i \geq 0$. つまり $A \geq 0$.

更に等号は $\boldsymbol{x} = 0$ のときに限るためには $\lambda_i > 0$. つまり $A > 0$ であることが分かる. まとめると

$$A \geq 0 \iff \lambda_i \geq 0 \text{ for } \forall i.$$

$$A > 0 \iff \lambda_i > 0 \text{ for } \forall i.$$

この同値性から $A > 0$ のとき $A^{-1} > 0$ も分かる.

また実ベクトル $\boldsymbol{v}$ に対して $A = \boldsymbol{v}\boldsymbol{v^T}$ とおくと, A は実対称であり, 任意の $\boldsymbol{x}$ に対して

$$\boldsymbol{x^T}A\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{v^T}\boldsymbol{x})^2 \geq 0$$

なので $A \geq 0$.

2.7 予測分布の分散

$S_N^{-1} = S_0^{-1} + \beta\Phi_N^{\boldsymbol{T}}\Phi_N$ としたときの予測分布の分散

$$\sigma_N^2 = \frac{1}{\beta} + \phi^{\boldsymbol{T}} S_N \phi$$

を考える. $\beta > 0$ であり, S_0 は共分散行列なので実正定値であることに注意する. まず計画行列 Φ_N は N が一つ増える毎に 1 行増える. v を M 次元縦ベクトルとして

$$\Phi_{N+1}^{\boldsymbol{T}} = \begin{pmatrix} \Phi_N^{\boldsymbol{T}} & v \end{pmatrix}$$

としよう. すると

$$S_{N+1}^{-1} = S_0^{-1} + \beta(\Phi_N^{\boldsymbol{T}}\Phi_N + vv^{\boldsymbol{T}}) = S_N^{-1} + \beta vv^{\boldsymbol{T}}.$$

行列 $A = \beta vv^{\boldsymbol{T}}$ は正定値であり, S_N に関して帰納法を使うと全ての S_N は正定値であることが分かる.

公式 1 を使って

$$\begin{aligned}\sigma_{N+1}^2 &= \frac{1}{\beta} + \phi^{\boldsymbol{T}}(S_N^{-1} + \beta v v^{\boldsymbol{T}})^{-1}\phi \\ &= \frac{1}{\beta} + \phi^{\boldsymbol{T}}(S_N - \frac{(S_N v)(v^{\boldsymbol{T}} S_N)}{1 + v^{\boldsymbol{T}} S_N v})\phi \\ &= \sigma_N^2 - z\end{aligned}$$

ここで S_N は対称なので

$$\begin{aligned}z &= \phi^{\boldsymbol{T}} \frac{(S_N v)(v^{\boldsymbol{T}} S_N)}{1 + v^{\boldsymbol{T}} S_N v}\phi \\ &= \frac{1}{1 + v^{\boldsymbol{T}} S_N v}(v^{\boldsymbol{T}} S_N \phi)^2.\end{aligned}$$

S_N は正定値なので任意の v に対して $v^{\boldsymbol{T}} S_N v \geq 0$. よって $z \geq 0$ となり

$$\sigma_{N+1}^2 \leq \sigma_N^2.$$

帰納法の流れを見ると,

$$\Phi_N^{\boldsymbol{T}} = \big(\phi(x_1) \cdots \phi(x_N)\big)$$

とおくと

$$S_N^{-1} = S_0^{-1} + \beta \sum_{i=1}^{N} \phi(x_i)\phi(x_i)^{\boldsymbol{T}}$$

となることがわかる.