計算用紙

データ生成

以下の規則にしたがってランダムウォークのデータを生成しましょう．

$$ \begin{align} W_{t+1} &= W_t + z_t \end{align} $$

ただし，z_tは独立に等確率で生成され，以下のような規則になります． $$ z_t = \left{ , \begin{aligned} & 1 \ & 0 \ & -1 \end{aligned} \right. $$

問題1

z_tの期待値，分散，共分散を求めよ．

問題2

W_tの期待値，分散，共分散を求めよ．

動径基底関数回帰

基底関数を動径基底関数 $$ \phi_h (x) = \exp{{-\frac{(x-\mu_h)^2}{\sigma^2}}}\ , \ (h = -H , \frac{1}{H} - H , ... , - \frac{1}{H}+H , H) $$

としたときの回帰問題を扱います．

問題3

$H=10$として，μ_hを-1から1まで0.2刻みで変化させたときの基底関数のグラフを描け．

問題4

動径基底関数に$x=3$,$\mu_h=0$,$\sigma=1$を入れたときの値を求めよ．

問題5

計画行列Φは以下のようになる． $$ \Phi = \begin{pmatrix} \vec{\phi}(x_1) \ \vec{\phi}(x_2) \ \vec{\phi}(x_3) \ ・\ ・\ ・\ \vec{\phi}(x_{N_{train}}) \ \end{pmatrix} \ $$

このとき，Φの形状を求めよ．

また， $$ \Phi^{\top} \Phi $$ の形状を求めよ．

問題6

2×2行列の場合において，計画行列Xとしたとき

つまり $$ X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \ 1 & x_2 \ 1 & x_3 \ ・& ・\ ・ & ・\ ・ & ・\ 1 &x_{N_{train}} \ \end{pmatrix} \ :\ N_{train} × 2\ 行列 $$

とするとき $$ \hat{w}=(X^{\top} X)^{-1}X^{\top} \vec{y} $$

の各要素がよく知っている線型回帰の式と一致することを示せ．

問題7*

正規方程式を導出せよ．

リッジ回帰の場合は以下の様になる． $$ \hat{w}=(\Phi^{\top} \Phi + \alpha I)^{-1}\Phi^{\top} \vec{y} $$

ガウス過程回帰

データセット$\mathcal{D} = { (x_n , y_n) } _{n = 1,...,N}$が与えられています．

このデータセットからカーネルKを計算し，$\vec{y}$の分布を算出します．

このとき$y_n = f(x_n)$という関係が成り立つとしましょう．

そして，fはガウス過程 $$ f〜GP(\vec{0} , k(\vec{x},\vec{x}^{'})) $$

このときyについてデータをN個を並べたベクトル$\vec{y}$の分布は $$ \vec{y}〜\mathcal{N} (\vec{0} , K) $$ となります．

ただし，今回カーネルは以下のように定義します． $$ k(x , x^{'}) = \theta_1 \exp{\left(- \frac{(x - x^{'})^2}{\theta_2} \right)} + \theta_3 \delta(x , x^{'}) $$

まず学習するのは，$\vec{y}$の分布です．

つまり $$ \vec{y}〜\mathcal{N} (\vec{0} , K) $$ にあるKの部分を訓練データから学習します．

問題8

上で定義したカーネルに対して $$ k(x=1 , x^{\prime}=1) = \theta_1 \exp{\left(- \frac{(x - x^{'})^2}{\theta_2} \right)} + \theta_3 \delta(x , x^{'}) $$ を計算しなさい.

また，$k(1 , 2)$ではどうか

問題9

好きなだけカーネル行列の成分を計算して，カーネル行列を書きなさい.

ここで，カーネル行列とは $$ K^{(train) } = \begin{pmatrix} k(x_1 , x_1) & k(x_1,x_2) & k(x_1,x_3) & ・・・ & k(x_1,x_{N_{train}}) \ k(x_2,x_1) & k(x_2,x_2) & k(x_2,x_3) & ・・・ & k(x_2,x_{N_{train}}) \ k(x_3,x_1) & k(x_3,x_2) & k(x_3,x_3) & ・・・ & k(x_3,x_{N_{train}}) \ ・& ・& ・& ・・・ & ・\ ・& ・& ・& ・・・ & ・\ ・& ・& ・& ・・・ & ・\ k(x_{N_{train} }, x_1) & k(x_{N_{train}} , x_2) & k(x_{N_{train}} , x_3) & ・・・ & k(x_{N_{train}} , x_{N_{train}}) \ \end{pmatrix} $$

問題10

ガウス過程における$\vec{y}$の分布は $$ \vec{y}〜\mathcal{N} (\vec{0} , K) $$

である．問題9で得たカーネル行列を使い$\vec{y}$の分布を自分なりに書きなさい.

問題11*

新しいデータ点x^*が手に入った時，y^*の分布はどうなるか.

この時，y^*の予測分布は明示的に以下のようになる

$$ p(y^{*} / \vec{x}^{*} ,\mathcal{D}) = \mathcal{N} (\textbf{k}^{\top} * K^{-1} \vec{y} , \textbf{k}{**} - \textbf{k}^{\top} * K^{-1} \textbf{k}) $$ ただし $$ \textbf{k}_* = (k(x^*,x_1) , k(x^*,x_2) , k(x^*,x_3) ,.... ,k(x^*,x_{N_{train}}))\top $$ $$ k_{**} = k(x^*,x^*) $$