概 要

講義資料の解答とかをここに書くね。中間試験・期末試験の問題はここからしか出ないよ。

Lecture 5 の回答

線形回帰モデルへの変形

$$a = -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2) + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)}$$

の時、

$$\mathbf{w} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2)$$

$$w_0 = -\frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)}$$

とおくと、

$$a = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0$$

と表記できることを示す。

$$\begin{aligned} a &= -\frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1)^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_1) + \frac{1}{2}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2)^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\mathbf{x}-\boldsymbol{\mu}_2) + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)} \\ &= -\frac{1}{2}(\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1) + \\ &\quad -\frac{1}{2}(\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 - \boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2) + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)} \end{aligned}$$

ここで、$\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1$ はスカラなので転置をかけても等しくなるので、$(\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1)^T = \boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1^T}\mathbf{x} = \boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x}$ となる。ただし、$(ABC)^T = C^TB^TA^T$ と、Σ は対称行列で、対称行列の逆行列もまた対称行列となることから、$\boldsymbol{\Sigma}^{-1^T} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ を使った。これを使い、

$$\begin{aligned} a = &-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 \\ &+ \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)} \\ = &\,\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 - \boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)} \end{aligned}$$

ここで、$\mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0$ を計算すると、

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0 &= (\boldsymbol{\mu}_1^T - \boldsymbol{\mu}_2^T)\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)} \\ &= \boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\mathbf{x} - \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_1^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_1 + \frac{1}{2}\boldsymbol{\mu}_2^T\boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{\mu}_2 + \ln\frac{p(C_1)}{p(C_2)} \end{aligned}$$

となるので、$a = \mathbf{w}^T\mathbf{x} + w_0$ が示せた。

シグモイド関数の微分

$\sigma(x) = \frac{1}{1+\exp(-x)}$ の時、$\frac{d\sigma(x)}{dx} = \sigma(x)(1-\sigma(x))$ を示そう。

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma(x)}{dx} &= \frac{d(1+e^{-x})^{-1}}{dx} \\ &= -(1+e^{-x})^{-2}(-1)e^{-x} \quad (\because \frac{de^{-x}}{dx} = -e^{-x}) \\ &= (1+e^{-x})^{-2}e^{-x} \end{aligned}$$

ここで、右辺を計算すると、

$$
\begin{aligned}
\sigma(x)(1-\sigma(x)) &= (1+e^{-x})^{-1}\frac{1+e^{-x}-1}{1+e^{-x}} \\
&= (1+e^{-x})^{-2}e^{-x}
\end{aligned}
$$

よって、$\frac{d\sigma(x)}{dx} = \sigma(x)(1-\sigma(x))$ を示した。

交差エントロピー誤差関数の微分

$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \sum_{n=1}^{N}(t_n - y_n)\boldsymbol{\phi}_n$ を示そう。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} &= \sum_{n=1}^{N}\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}(t_n \ln y_n + (1-t_n)\ln(1-y_n)) \\
&= \sum_{n=1}^{N}(t_n \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\ln y_n + (1-t_n)\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\ln(1-y_n))
\end{aligned}
$$

まずは $\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\ln y_n$ を計算しよう。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\ln y_n &= \frac{1}{y_n}\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}y_n \quad (\because \frac{d\ln x}{dx} = \frac{1}{x}) \\
&= \frac{1}{\sigma(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\phi}_n)}\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\sigma(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\phi}_n) \\
&= \frac{1}{\sigma(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\phi}_n)}\sigma(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\phi}_n)(1-\sigma(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\phi}_n))\boldsymbol{\phi}_n \quad (\because \frac{d\sigma(x)}{dx} = \sigma(x)(1-\sigma(x))) \\
&= (1-y_n)\boldsymbol{\phi}_n
\end{aligned}
$$

次に、$\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\ln(1-y_n)$ を計算しよう。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}\ln(1-y_n) &= \frac{1}{1-y_n}\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}(1-y_n) \\
&= \frac{1}{1-y_n}\cdot -\frac{\partial}{\partial \mathbf{w}}y_n \\
&= \frac{1}{1-y_n}\cdot -y_n(1-y_n)\boldsymbol{\phi}_n \\
&= -y_n\boldsymbol{\phi}_n
\end{aligned}
$$

これにより、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} &= \sum_{n=1}^{N}(t_n(1-t_n)\boldsymbol{\phi}_n + (1-t_n)(-y_n\boldsymbol{\phi}_n)) \\
&= \sum_{n=1}^{N}(t_n - y_n)\boldsymbol{\phi}_n
\end{aligned}
$$

と示せた。

意地悪な問題

$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \sum_{n=1}^{N}(t_n - y_n)\phi_n = 0$ となるような $\mathbf{w}$ を解析的に導出してみよう。

$$\sum_{n\ =1}^{N} t_n\phi_n = \sum_{n=1}^{N} y_n\phi_n$$

$$\sum_{n=1}^{N} t_n\phi_n = \sum_{n=1}^{N} \sigma(\mathbf{w}^T\boldsymbol{\phi}_n)\phi_n$$

さて、線形回帰の時には、

$$\sum_{n=1}^{N} t_n\boldsymbol{\phi}_n^\top = \mathbf{w}^\top \sum_{n=1}^{N} \boldsymbol{\phi}_n\boldsymbol{\phi}_n^\top \tag{1}$$

となり、$\Phi = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}(x_1) \\ \boldsymbol{\phi}(x_2) \\ \cdots \\ \boldsymbol{\phi}(x_N) \end{pmatrix}$ とおくことによって、$\Phi^\top\mathbf{t} = \mathbf{w}^\top\Phi^\top\Phi$ と変形できた。しかし、今回は非線形の関数 σ があるために $\mathbf{w}$ を Σ の外側に移動できない！(非線形関数は行列では表現できないことに注意しよう)

線形識別モデルのヘッセ行列

$\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N}(y_n - t_n)\boldsymbol{\phi}_n$ の時に $\mathbf{H} = \nabla\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^{N} y_n(1-y_n)\boldsymbol{\phi}_n\boldsymbol{\phi}_n^\top$ となることを示そう。ただし、$\frac{\partial x\mathbf{a}}{\partial \mathbf{w}} = \mathbf{a}^T\frac{\partial x}{\partial \mathbf{w}}$ (x は $\mathbf{w}$ の関数)

$y_n' = y_n(1-y_n)\boldsymbol{\phi}_n$ より、$\mathbf{H} = \sum \frac{\partial y_n\boldsymbol{\phi}_n}{\partial \mathbf{w}} = \sum \boldsymbol{\phi}_n^T y_n(1-y_n)\boldsymbol{\phi}_n$

softmax 関数の微分

$y_k(\boldsymbol{\phi}) = p(C_k|\boldsymbol{\phi}) = \frac{\exp(a_k)}{\sum_j \exp(a_j)}$ $(a_k = \mathbf{w}_k^T\boldsymbol{\phi})$ に対し、$\frac{\partial y_k}{\partial a_j} = y_k(I_{kj} - y_j)$ を示そう。

$$\frac{\partial}{\partial a_k}y_k = \frac{\exp(a_k)(\sum\exp(a_j)) - \exp(a_k)\exp(a_k)}{(\sum\exp(a_j))^2} = y_k - y_k^2 \tag{2}$$

$k \neq j$ として

$$\frac{\partial}{\partial a_j}y_k = -\frac{\exp(a_k)\exp(a_j)}{(\sum\exp(a_j))^2} = y_k y_j \tag{3}$$

よってこの二つをまとめて、$\frac{\partial y_k}{\partial a_j} = y_k(I_{kj} - y_j)$