

## 概 要

講義資料の解答をここに書く。中間試験・期末試験の問題はここからしか出ない。

## Lecture 2 の回答

### 線形回帰モデルへの変形

$\sum_{k=1}^n (k^2 - 2k + 1)$  を求める。

$$\sum_{k=1}^n (a_k + b_k) = \sum_{k=1}^n a_k + \sum_{k=1}^n b_k$$

より、 $\sum_{k=1}^n (k^2 - 2k + 1) = \sum_{k=1}^n k^2 - \sum_{k=1}^n 2k + \sum_{k=1}^n 1 = \sum_{k=1}^n k^2 - \sum_{k=1}^n 2k + n$

$$\sum_{k=1}^n ca_k = c \sum_{k=1}^n a_k$$

より、 $\sum_{k=1}^n k^2 - \sum_{k=1}^n 2k + n = \sum_{k=1}^n k^2 - 2 \sum_{k=1}^n k + n$

$$1^2 + 2^2 + 3^2 + \cdots + n^2 = \sum_{k=1}^n k^2 = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1)$$

より、 $\sum_{k=1}^n k^2 - 2 \sum_{k=1}^n k + n = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1) - 2 \sum_{k=1}^n k + n$

$$1 + 2 + 3 + \cdots + n = \sum_{k=1}^n k = \frac{1}{2}n(n+1)$$

より、 $\frac{1}{6}n(n+1)(2n+1) - 2 \sum_{k=1}^n k + n = \frac{1}{6}n(n+1)(2n+1) - n(n+1) + n = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n$

### min 関数

$$\min\{0, 1, 2\} = 0$$

この場合、min 関数は与えられた集合のうち最小の要素を返す。

$$\min_x (x - 1)^2 = 0$$

この場合、min 関数は与えられた関数について、min の下のパラメータ（ここでは  $x$ ）を調節して得られる関数の最小値を返す。

$$\operatorname{argmin}_x (x - 1)^2 = 1$$

argmin 関数は、与えられた関数を argmin の下のパラメータ（ここでは  $x$ ）を調節して最小化する時の、パラメータの値を返す。

### 罰金項を含めた最適化

$\frac{\partial \tilde{E}(\mathbf{w})}{\partial w_i}$  を算出する。ここで、

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2$$

$$\|\mathbf{w}\|^2 \equiv \mathbf{w}^\top \mathbf{w} = w_0^2 + w_1^2 + \cdots + w_M^2$$

$$y(x, \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^M w_j x^j$$

とする。

$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial w_i} = \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\} x_n^i$  より、あとは  $\frac{\partial}{\partial w_i} (\frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2)$  を計算すれば良い。

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial w_i} (\frac{\lambda}{2} \|\mathbf{w}\|^2) \\ = \lambda w_i \end{aligned}$$

よって、 $\frac{\partial \tilde{E}(\mathbf{w})}{\partial w_i} = \sum_{n=1}^N \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\} x_n^i + \lambda w_i$  となる。

## Lecture 3 の回答

### 対数関数と総乗

$\ln \prod_{n=1}^N x_n^2$  を計算する。 $\ln(a \cdot b) = \ln a + \ln b$  という性質を総乗の形で一般化すると、

$$\ln \prod_{n=1}^N a_n = \sum_{n=1}^N \ln a_n$$

となるので、 $\ln \prod_{n=1}^N x_n^2 = \sum_{n=1}^N \ln x_n^2 = \sum_{n=1}^N 2 \ln x_n$  となる。

### 対数関数と argmax

実関数  $f(x)$  において、 $\operatorname{argmax}_x f(x)$  と  $\operatorname{argmax}_x \ln f(x)$  の値が同じになることを示す。

実関数  $f(x)$  が  $x = a$  において最大になるとする。つまり、 $a$  の任意の前後の値、 $b < a < c$  において、 $f(b) < f(a)$ 、 $f(c) < f(a)$  となる。さて、対数関数は単調増加性を持つので、 $x < y \Rightarrow \log x < \log y$  となる。これらを組み合わせると、 $f(b) < f(a) \Rightarrow \ln f(b) < \ln f(a)$ 、 $f(c) < f(a) \Rightarrow \ln f(c) < \ln f(a)$  となる。つまり、対数関数が適用されても、 $f(x)$  を最大化する値 (ここでは  $a$ ) は変わらない、ということである。よって、 $\operatorname{argmax}_x f(x) = \operatorname{argmax}_x \ln f(x)$  が示された。

### 対数関数とガウス分布

$N(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right)$  に対して対数関数を適用する。

$$\begin{aligned} \ln N(x|\mu, \sigma^2) &= \ln \left( \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) \right) \\ &= \ln \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} + \ln \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) \quad (\because \log_c(a \cdot b) = \log_c a + \log_c b) \\ &= \ln(2\pi\sigma^2)^{-1/2} + \ln \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) \\ &= -\frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2) + \ln \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) \\ &= -\frac{1}{2} \ln(2\pi\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2 \quad (\because \ln \exp x = \ln e^x = x) \end{aligned}$$

## 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、 $(\mathbf{x}^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}_1)^T = \boldsymbol{\mu}_1^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x} = \boldsymbol{\mu}_1^T \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \mathbf{x}$  となる。ただし、 $(ABC)^T = C^T B^T A^T$  と、 $\boldsymbol{\Sigma}$  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、 $\boldsymbol{\Sigma}^{-1T} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}$  を使った。これを使い、

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

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

$\frac{\partial E(\mathbf{w})}{\partial \mathbf{w}} = \sum_{n=1}^N (t_n - y_n) \phi_n$  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。

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

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

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

これにより、

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

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。

$$\begin{aligned}\sum_{n=1}^N t_n \phi_n &= \sum_{n=1}^N y_n \phi_n \\ \sum_{n=1}^N t_n \phi_n &= \sum_{n=1}^N \sigma(\mathbf{w}^T \phi_n) \phi_n\end{aligned}$$

さて、線形回帰の時には、

$$\sum_{n=1}^N t_n \phi_n^\top = \mathbf{w}^\top \sum_{n=1}^N \phi_n \phi_n^\top \quad (1)$$

となり、 $\Phi = \begin{pmatrix} \phi(x_1) \\ \phi(x_2) \\ \dots \\ \phi(x_N) \end{pmatrix}$  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  $\sigma$  があるために  $\mathbf{w}$  を  $\Sigma$  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

$\nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^N (y_n - t_n) \phi_n$  の時に  $\mathbf{H} = \nabla \nabla E(\mathbf{w}) = \sum_{n=1}^N y_n (1 - y_n) \phi_n \phi_n^\top$  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)

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

## softmax 関数の微分

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

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

$k \neq j$  として

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

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