1　4 章前書き

クラス分類の説明は読み合わせ。本章では一般化線形モデルを取り扱う。これまで学んできた線形回帰モデルとの決定的な違いを理解することが重要であり、その違いとは

・線形回帰モデル；パラメタ（これまでの章では $\boldsymbol{w}$ で表現してきた）について線形

・一般化線形モデル；パラメタについて非線形（式（4.3）にあるように、$\boldsymbol{w}$ に対して非線形関数 f をかますため）

となっている。本章では、この一般化線形モデルの解析方法について学んでいく。この一般化線形モデルがクラス分類において非常に有用である[*1]ことを体験してほしい。

2　識別関数

まだ、しばらくは一般化線形モデルを本格的に取り扱うことはしない。まずは先の章と同じく線形モデルについて考えていく。初めの例として取り扱うものは Linear discriminant analysis（以下 LDA）であり、

・2 クラス分類

・K クラス分類

の両方の場合で識別関数の表式（決定領域を分かつ超平面の式）に関係する計算を学ぶ。

2.1　2 クラス

ここでの目標は 2 クラス分類問題において、識別関数、つまり超平面の式の取り扱いに慣れることである。

まず、準備として最も簡単な線形識別関数の式

$$y(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + w_0 \tag{1}$$

について各変数の定義を確認する。詳細は教科書を参考にされたい。得られた入力ベクトル $\boldsymbol{x}$ を式 1 によって、決定領域に分類することを考える。決定領域を分かつ超平面の次元は、入力次元より 1 つ小さくなることは簡単に理解できる[*2]。

次に、バイアスパラメタと呼ばれる量 w_0 について理解するために、原点からこの超平面までの距離を考える。その距離は、$\boldsymbol{x}$ を超平面上の垂線の足とすると、$y(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + w_0 = 0$ であることから[*3]、点と超平面間の距離の公式[*4]を使うことによって

$$\frac{\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}}{|\boldsymbol{w}|} = -\frac{w_0}{|\boldsymbol{w}|} \tag{2}$$

と求められる。この式を見ると、バイアスパラメタ w_0 は原点から超平面までの距離を制御する量であることがわかる。

[*1] そして「良い」分類ができるモデルである。

[*2] 例えば教科書の図 4.1 の入力次元が 2 である場合については、超平面の式の次元は 1 次元、つまり直線となる。

[*3] $\boldsymbol{x}$ が境界上に乗っているのだから自明である。

[*4] これは一応右記サイトで証明を確認しよう（> https://wasan.hatenablog.com/entry/2013/09/25/235836）。とは言うものの、この公式自体は点と直線の距離の公式から、自然な拡張によって理解できる。

次に超平面から任意の点 $\boldsymbol{x}$ までの直交距離が $y(\boldsymbol{x})$ を用いて表せることを確かめる。任意の点 $\boldsymbol{x}$ の超平面への直交射影点を $\boldsymbol{x}_\perp$ とすると、次の関係式が成り立つ[*5]。

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_\perp + r\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|} \tag{3}$$

ここで、r は求めたい直交距離であり、$\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|}$ は超平面からの単位法線ベクトルである。この式を r について解くために以下のように式変形を行なっていく。

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp + \boldsymbol{w}^T r\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|} \\
\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp + r\frac{|\boldsymbol{w}|^2}{|\boldsymbol{w}|} \\
\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + w_0 &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp + w_0 + r|\boldsymbol{w}| \\
y(\boldsymbol{x}) &= 0 + r|\boldsymbol{w}| \ ((4.4), y(\boldsymbol{x}_\perp) = \boldsymbol{w}^T x_\perp + w_0 = 0) \\
r &= \frac{y(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{w}|} \qquad (4)
\end{aligned}$$

これが超平面から点 $\boldsymbol{x}$ への距離となる。

最後にバイアスパラメタも重みベクトルの 1 成分に加えてしまうアイディアを学ぶ。ここは読み合わせ[*6]。

[*5] これだけだと当然わかりづらいので、最後の頁に理解を助けるための図を描きます。そちらを参照ください（Go to 頁 3)。← 2/4 時点ではまだ描けていません。2/5 には準備しますのでお待ちを。

[*6] この考え方は 3 章の線形モデルでも学んでいる。p.136 の式（3.3）などが、その例である。

次に超平面から任意の点 $\boldsymbol{x}$ までの直交距離が $y(\boldsymbol{x})$ を用いて表せることを確かめる。任意の点 $\boldsymbol{x}$ の超平面への直交射影点を $\boldsymbol{x}_\perp$ とすると、次の関係式が成り立つ[*5]。

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_\perp + r\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|} \tag{3}$$

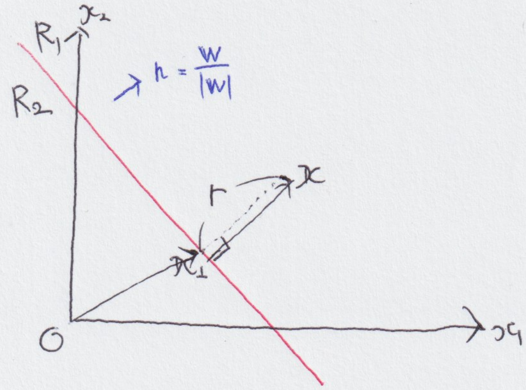
ここで、r は求めたい直交距離であり、$\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|}$ は超平面からの単位法線ベクトルである。この式を r について解くために以下のように式変形を行なっていく。

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp + \boldsymbol{w}^T r\frac{\boldsymbol{w}}{|\boldsymbol{w}|} \\
\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp + r\frac{|\boldsymbol{w}|^2}{|\boldsymbol{w}|} \\
\boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x} + w_0 &= \boldsymbol{w}^T\boldsymbol{x}_\perp + w_0 + r|\boldsymbol{w}| \\
y(\boldsymbol{x}) &= 0 + r|\boldsymbol{w}| \ ((4.4), y(\boldsymbol{x}_\perp) = \boldsymbol{w}^T x_\perp + w_0 = 0) \\
r &= \frac{y(\boldsymbol{x})}{|\boldsymbol{w}|} \qquad (4)
\end{aligned}$$

これが超平面から点 $\boldsymbol{x}$ への距離となる。

最後にバイアスパラメタも重みベクトルの 1 成分に加えてしまうアイディアを学ぶ。ここは読み合わせ[*6]。

[*5] これだけだと当然わかりづらいので、最後の頁に理解を助けるための図を描きます。そちらを参照ください（Go to 頁 3)。
[*6] この考え方は 3 章の線形モデルでも学んでいる。p.136 の式（3.3）などが、その例である。



n；wを方向ベクトルとする単位ベクトル

r；xと$x_\perp$間のキョリ

$$x = \underbrace{x_\perp}_{\text{Oから垂線の足}} + \underbrace{r\frac{w}{|w|}}_{\text{垂線の足から}x}$$

x，$x_\perp$と$\frac{w}{|w|}$の関係

（> Back to 頁2）