W8PRML 演習問題 3.2

大上 雅史　(@tonets)

2012/11/10

3.2（標準）

行列 $\mathbf{\Phi}(\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^\top$ は任意のベクトル $\mathbf{v}$ を $\mathbf{\Phi}$ の列ベクトルで張られる空間の上に正射影することを示せ．そしてこの結果を使って，最小二乗解 (3.15) は図 3.2 で示した多様体 $\mathcal{S}$ の上にベクトル $\mathbf{t}$ を正射影することに対応していることを示せ．

$$(3.15) — \mathbf{w}_{\mathrm{ML}} = (\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{t}$$

$\mathbf{\Phi}(\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^\top$ が正射影行列であることの証明

$\mathbf{\Phi} = (\boldsymbol{\varphi}_0, \boldsymbol{\varphi}_1, ..., \boldsymbol{\varphi}_{M-1})$ とおく．$\boldsymbol{\varphi}_i$ は N 次元列ベクトルである．$\mathbf{v}$ を $\mathbf{\Phi}$ の列ベクトルで張られる空間 $\mathrm{span}\{\boldsymbol{\varphi}_0, ..., \boldsymbol{\varphi}_{M-1}\} = \mathcal{S}$ に正射影したベクトルを $\mathbf{v}'$ とおくと，$\mathbf{v}'$ は $\boldsymbol{\varphi}_0, ..., \boldsymbol{\varphi}_{M-1}$ の線形結合で表せるので，$\{c_i\}$ を実数として，

$$\mathbf{v}' = \sum_{i=0}^{M-1} c_i\boldsymbol{\varphi}_i = (\boldsymbol{\varphi}_0, ..., \boldsymbol{\varphi}_{M-1})(c_0, ..., c_{M-1})^\top = \mathbf{\Phi}\mathbf{c}$$

と書ける．また，ベクトル $\mathbf{v} - \mathbf{v}'$ は $\mathcal{S}$ と直交することから，$\mathcal{S}$ を張る $\boldsymbol{\varphi}_i$ それぞれとも直交する．よって，

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\varphi}_0^\top(\mathbf{v} - \mathbf{v}') &= 0 \\
\boldsymbol{\varphi}_1^\top(\mathbf{v} - \mathbf{v}') &= 0 \\
&\vdots \\
\boldsymbol{\varphi}_{M-1}^\top(\mathbf{v} - \mathbf{v}') &= 0
\end{aligned}$$

となり，まとめて書くと

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi}_0^\top \\ \vdots \\ \boldsymbol{\varphi}_{M-1}^\top \end{pmatrix}(\mathbf{v} - \mathbf{\Phi}\mathbf{c}) &= \mathbf{0} \\
\mathbf{\Phi}^\top(\mathbf{v} - \mathbf{\Phi}\mathbf{c}) &= \mathbf{0} \\
\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{v} &= \mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi}\mathbf{c} \\
\mathbf{c} &= (\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{v}
\end{aligned}$$

を得る．さらに，$\mathbf{v}' = \mathbf{\Phi}\mathbf{c}$ であるから，

$$\mathbf{v}' = \mathbf{\Phi}(\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{v}$$

であるので，$\mathbf{\Phi}(\mathbf{\Phi}^\top\mathbf{\Phi})^{-1}\mathbf{\Phi}^\top$ は $\mathcal{S}$ に正射影する行列である．

最小二乗解 (3.15) が $\mathcal{S}$ にベクトル t を正射影することに対応していることの証明

※それぞれの文字は以下の通りである．

$$\mathsf{t} = \begin{pmatrix} t_1 \\ \vdots \\ t_N \end{pmatrix}, \quad \mathsf{y} = \begin{pmatrix} y(\mathbf{x}_1, \mathbf{w}) \\ \vdots \\ y(\mathbf{x}_N, \mathbf{w}) \end{pmatrix}, \quad y(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{w} = \begin{pmatrix} w_0 \\ \vdots \\ w_{M-1} \end{pmatrix},$$

$$\boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}) = (\phi_0(\mathbf{x}), ..., \phi_{M-1}(\mathbf{x}))^\top, \quad \boldsymbol{\varphi}_i = \begin{pmatrix} \phi_i(\mathbf{x}_1) \\ \vdots \\ \phi_i(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\Phi} = \begin{pmatrix} \phi_0(\mathbf{x}_1) & \phi_1(\mathbf{x}_1) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_1) \\ \phi_0(\mathbf{x}_2) & \phi_1(\mathbf{x}_2) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_0(\mathbf{x}_N) & \phi_1(\mathbf{x}_N) & \cdots & \phi_{M-1}(\mathbf{x}_N) \end{pmatrix}$$

y に対する最小二乗解は,

$$y(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) = \mathbf{w}^\top \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i) = \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_i)^\top \mathbf{w}$$

を縦に並べて，$\mathbf{w} = \mathbf{w}_{\mathrm{ML}}$ を用いて,

$$\mathsf{y} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_1)^\top \mathbf{w}_{\mathrm{ML}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{\phi}(\mathbf{x}_N)^\top \mathbf{w}_{\mathrm{ML}} \end{pmatrix} = \boldsymbol{\Phi}\mathbf{w}_{\mathrm{ML}}$$

と表せるので，$\mathbf{w}_{\mathrm{ML}} = (\boldsymbol{\Phi}^\top \boldsymbol{\Phi})^{-1} \boldsymbol{\Phi}^\top \mathsf{t}$ より,

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

よって，y は図 3.2 の $\boldsymbol{\Phi}$ の列ベクトル $\boldsymbol{\varphi}_i$ で張られる部分空間 $\mathcal{S}$ への正射影となっている．

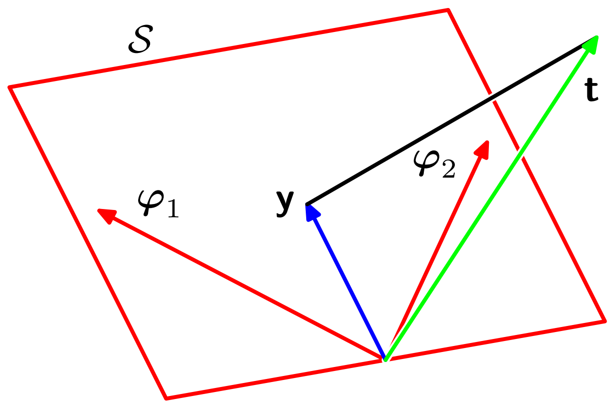

図 3.2