演習問題 1.02

正則化された二乗和誤差関数 (1.4) を最小にする係数 w_i が満たす、式 (1.122) に類似した線形方程式系を書き下せ。

$$\sum_{j=0}^{M} A_{ij} w_j = T_i$$

$$\cdots (1.122)$$

ただし、

$$A_{ij} = \sum_{j=0}^{N} (x_n)^{i+j} , \qquad T_i = \sum_{j=0}^{N} (x_n)^{i} t_n$$

$$\cdots (1.123)$$

ここで、下付き添え字の i や j は成分を表し、$(x)^i$ は x の j 乗を表す。

$$y (x , \mathbf{w}) = w_0 + w_1 x + w_2 x^2 + \cdots + w_M x^M = \sum_{j=0}^{M} w_j x^j$$

$$\cdots (1.1)$$

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

$$\cdots (1.4)$$

[解]

式 (1.4) に式 (1.1) を代入することにより、式 (1.4) は以下のように変形できる。

$$\tilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \left\{ \sum_{j=0}^{M} w_j x_n^j - t_n \right\}^2 + \frac{\lambda}{2} \sum_{j=0}^{M} w_j^2$$

ここで、$\tilde{E}(\mathbf{w})$ を最小化するために、$\tilde{E}(\mathbf{w})$ を w_i について微分すると、

$$\frac{d\tilde{E}(\mathbf{w})}{dw_i} = \frac{1}{2} \cdot 2 \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{j=0}^{M} w_j x_n^j - t_n \right) \left(\sum_{j=0}^{M} w_j x_n^j - t_n \right)' + 2 \cdot \frac{\lambda}{2} w_i$$

$\mathbf{w} = w_j = \{ w_0 , w_1 , \cdots , w_M \}$ であり、w_i は w_j の中に含まれる 1 個の要素である。これは、すなわち

$$y (x_n , \mathbf{w}) = \sum_{j=0}^{M} w_j x_n^j = w_0 x_n^0 + w_1 x_n^1 + w_2 x_n^2 + \cdots + w_i x_n^i + \cdots + w_M x_n^M$$

を満たす。ここで、i の範囲は、$0 \leq i \leq M$ となる。$y (x_n , \mathbf{w})$ を w_i で微分すると、

$$\frac{d\, y(\, x_n\,,\ \mathbf{w}\,)}{dw_i} = x_n^i$$

となる。

$$= \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{j=0}^{M} w_j\, x_n^j \; - \; t_n \right) x_n^i \;\; + \; \lambda\, w_i \;\; = \;\; \mathbf{0}$$

$$\sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{j=0}^{M} w_j\, x_n^j \; - \; t_n \right) x_n^i \;\; = \; - \lambda\, w_i$$

$$\sum_{n=1}^{N} \sum_{j=0}^{M} w_j\, x_n^{\,i+j} \;\; = \; \sum_{n=1}^{N} t_n\, x_n^i \; - \; \lambda\, w_i$$

$$\sum_{j=0}^{M} w_j \; \sum_{n=1}^{N} (\, x_n\,)^{\,i+j} \;\; = \; \sum_{n=1}^{N} t_n\, (\, x_n\,)^{\,i} \;\; - \; \lambda\, w_i$$

上記の式は、式（ 1.123 ）を用いることにより、

$$\sum_{j=0}^{M} A_{ij}\, w_j = T_i \; - \; \lambda\, w_i$$

と書き表すことができる。以上より、正則化された二乗和誤差関数（ 1.4 ）を最小にする係数 w_i が満たす、式（ 1.122 ）に類似した線形方程式系で書き下すことができた。