PRML 1章 演習問題

mei

問題 1.1

$$y(x, \mathbf{w}) = \sum_{j=1}^{M} w_j x_j, \qquad E(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2$$
 (1)

二乗和誤差 (1) を最小にする係数 ${m w} = \{w_i\}$ が次の線形方程式の解として与えられることを示す

$$\sum_{j=0}^{M} A_{ij} w_j = T_i \tag{2}$$

ただし、

$$A_{ij} = \sum_{n=1}^{N} (x_n)^{i+j}, \qquad T_i = \sum_{n=1}^{N} (x_n)^i t_n$$

解答

$$\frac{\partial E}{\partial w_i} = \sum_{n=1}^{N} (y_n(x_n, \boldsymbol{w}) - t_n) \frac{\partial}{\partial w_i} (y_n(x_n, \boldsymbol{w}) - t_n)$$
$$= \sum_{n=1}^{N} \left(\sum_{j=0}^{M} (x_n)^j w_j - t_n \right) (x_n)^i$$
$$= 0$$

の時に最小になる よって、

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

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

となり、(2)を得る。

補足

Eは w_i について下に凸な二次関数だから $\frac{\partial E}{\partial w_i} = 0$ となる w_i が E を最小にする

式 (1) に正則化項がついた次の誤算関数を最小にする係数 w_i が満たす式を求める

$$\widetilde{E}(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} \{y(x_n, \mathbf{w}) - t_n\}^2 + \frac{\lambda}{2} ||\mathbf{w}||^2$$
 (3)

解答

問題 1.1 と同様の計算により、

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

$$= 0$$

よって、

$$\sum_{i=0}^{M} A_{ij} w_j = T_i - \lambda w_i \tag{4}$$

ただし、

$$A_{ij} = \sum_{n=1}^{N} (x_n)^{i+j}, \qquad T_i = \sum_{n=1}^{N} (x_n)^i t_n$$

が w_i が満たすべき線形方程式系になる

問題 1.3・

下の表のような箱がある。箱を p(r)=0.2, p(b)=0.2, p(g)=0.6 の確率でランダムに選び果物を区別せず等確率で取り出す時、(i) りんごを取り出す確率、(ii) 選んだ果物がオレンジであった時それが g の箱から取り出されたものである確率、を求める

箱	りんご	オレンジ	ライム
r	3	4	3
b	1	1	0
g	3	3	4

解答

(i)

$$\begin{split} p(F=a) &= \sum_{B} p(F=a|B)p(B) \\ &= p(F=a|B=r)p(B=r) + p(F=a|B=b)p(B=b) + p(F=a|B=g)p(B=g) \\ &= \frac{3}{10} \cdot \frac{1}{5} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{5} + \frac{3}{10} \cdot \frac{3}{5} \\ &= \frac{17}{50} \end{split}$$

(ii)

$$p(B = g|F = o) = \frac{p(F = o|B = g)p(B = g)}{p(F = o)}$$
$$= \frac{\frac{3}{10} \cdot \frac{3}{5}}{\frac{4}{10} \cdot \frac{1}{5} + \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{5} + \frac{3}{10} \cdot \frac{3}{5}}$$
$$= \frac{1}{2}$$

問題 1.4 -

連続変数 x 上で定義された確立密度 $p_x(x)$ を考える。x=g(y) による変換を施した場合 y についての密度を最大にする位置 \hat{y} と x についての密度を最大にする位置 \hat{x} との間に一般には $\hat{x}=g(\hat{y})$ の関係が成り立たないことを示す。また、線形変換ではこの式が成り立つことも示す。

解答

次の式を示す。

$$var[f] = \mathbb{E}[f(x)^{2}] - \mathbb{E}[f(x)]^{2}$$

解答

$$\begin{aligned} \operatorname{var}[f] &= \mathbb{E}\left[(f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2 \right] \\ &= \int p(x) (f(x) - \mathbb{E}[f(x)])^2 dx \\ &= \int p(x) f(x)^2 dx - 2 \mathbb{E}[f(x)] \int p(x) f(x) dx + \mathbb{E}[f(x)]^2 \int p(x) dx \\ &= \mathbb{E}[f(x)^2] - 2 \mathbb{E}[f(x)] \mathbb{E}[f(x)] + \mathbb{E}[f(x)]^2 \\ &= \mathbb{E}[f(x)^2] - \mathbb{E}[f(x)]^2 \end{aligned}$$

より示せた。

補足

3 行目から 4 行目では E[f(x)] の定義と p(x) が規格化されていることを用いた。

問題 1.6 -

2つの変数 x,y が独立ならそれらの共分散が 0 になることを示す

解答

$$cov[x, y] = \mathbb{E}_{x,y}[xy] - \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y]$$
(5)

一方、

$$\mathbb{E}_{x,y}[xy] = \sum_{x} \sum_{y} p(x,y)xy$$

であり、x,y が独立であることから p(x,y)=p(x)p(y) とかけるので、

$$\mathbb{E}_{x,y}[xy] = \sum_{x} \sum_{y} p(x,y)xy$$
$$= \sum_{x} \sum_{y} p(x)p(y)xy$$
$$= \sum_{x} p(x)x \sum_{y} p(y)y$$
$$= \mathbb{E}[x]\mathbb{E}[y]$$

となる。

これと(5)式より、

$$\mathrm{cov}[x,y]=0$$

が示される。

次の1変数ガウス分布に関する規格化条件を証明する

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = 1$$

解答

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = I$$

とおき、 I^2 を考える。

$$\begin{split} I^2 &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(y|\mu, \sigma^2) dy \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) \mathcal{N}(y|\mu, \sigma^2) dx dy \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x-\mu)^2\right) \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (y-\mu)^2\right) dx dy \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} \left[(x-\mu)^2 + (y-\mu)^2 \right] \right) dx dy \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x^2 + y^2)\right) dx dy \end{split}$$

最後の行は改めて $x-\mu \to x, y-\mu \to y$ とおいた。 ここで、極座標変換を施すと、

$$\begin{split} I^2 &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x^2 + y^2)\right) dx dy \\ &= \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{2\pi} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}r^2\right) r dr d\theta \\ &= \frac{1}{\sigma^2} \int_{0}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}r^2\right) r dr \\ &= -\int_{0}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}r^2\right) \left(-\frac{1}{2\sigma^2}r^2\right)' dr \\ &= -\left[\exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}r^2\right)\right]_{0}^{\infty} \\ &= 1 \end{split}$$

よって、 $I \ge 0$ より I = 1 が示された

1変数ガウス分布の平均値が μ で与えられることを示し、次に規格化条件

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = 1$$

の両辺を σ^2 に関して微分することで、ガウス分布の 2 次のモーメントを求める。最後に分散を求める。

まず、 $\mathbb{E}[x]$ を求める。

$$\mathbb{E}[x] = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) x dx$$
$$= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x - \mu)^2\right) x dx$$

ここで、 $x - \mu \rightarrow x$ と置き換えると、

$$\begin{split} \mathbb{E}[x] &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right) (x+\mu) dx \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right) x dx + \mu \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right) dx \\ &= C \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right) \left(-\frac{1}{2\sigma^2}x^2\right)' dx + \mu \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx \qquad (C: \text{Const.}) \\ &= 0 + \mu \cdot 1 \\ &= \mu \end{split}$$

 $\mathbb{E}[x^2]$ については、

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) dx = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) dx$$

$$= 1$$

の両辺を σ^2 について微分すると、

$$\begin{split} -\frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \frac{1}{\sigma^3} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x-\mu)^2\right) dx + \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x-\mu)^2\right) \left(\frac{1}{2\sigma^4} (x-\mu)^2\right) dx \\ = -\frac{1}{2\sigma^2} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x-\mu)^2\right) dx + \frac{1}{2\sigma^4} \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2} (x-\mu)^2\right) (x-\mu)^2 dx \\ = -\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} (\mathbb{E}[x^2] - 2\mu \mathbb{E}[x] + \mu^2) \\ = -\frac{1}{2\sigma^2} + \frac{1}{2\sigma^4} (\mathbb{E}[x^2] - \mu^2) \\ = 0 \end{split}$$

よって、

$$\mathbb{E}[x^2] = \mu^2 + \sigma^2$$

を得る。以上より、分散は

$$var[x] = \mathbb{E}[x^2] - \mathbb{E}[x]^2$$
$$= \mu^2$$

と求められる。

1 変数ガウス分布 (6) のモードおよび多変量ガウス分布 (7) のモードが μ や μ で与えられることを示す。

$$\mathcal{N}(x|\mu, \sigma^2) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right)$$
 (6)

$$\mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{1}{(2\pi)^{D/2}} \frac{1}{|\boldsymbol{\Sigma}|^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\mu})\right)$$
(7)

解答

まず1変数について考える。上に凸なので微分が0になる点で確率分布が最大値を取る

$$\begin{split} \frac{d}{dx}\mathcal{N}(x|\mu,\sigma^2) &= \frac{d}{dx} \left[\frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) \right] \\ &= \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/2}} \frac{-1}{\sigma^2}(x-\mu) \exp\left(-\frac{1}{2\sigma^2}(x-\mu)^2\right) \\ &= 0 \end{split}$$

よって $x = \mu$ で $\mathcal N$ が最大になる、つまりモードが μ で与えられる。

次に多変量の場合を考える。指数部分の二次形式を考えると、

$$-\frac{1}{2}(x - \mu)^{\mathrm{T}} \Sigma^{-1}(x - \mu) = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{D} \sum_{i=1}^{D} (x_i - \mu_i)^2 \text{cov}[x_i, x_j]$$

となるため、勾配が0になるとき

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \mathcal{N}(\boldsymbol{x}|\boldsymbol{\mu}, \boldsymbol{\Sigma}) = \frac{-1}{2} \sum_{i=1}^{D} 2(x_k - \mu_k) \text{cov}[x_i, x_k]$$
$$= -(x_k - \mu_k) \sum_{i=1}^{D} \text{cov}[x_i, x_k]$$

よって、 $x_k = \mu_k$ の時 $\mathcal N$ が最大になる、つまりモードが $\boldsymbol \mu$ で与えられる

問題 1.10 —

1 変数ガウス分布のモードおよび多変量ガウス分布のモードが μ や μ で与えられることを示す。

問題 1.11 —

1 変数ガウス分布のモードおよび多変量ガウス分布のモードが μ や μ で与えられることを示す。