宿題 1

訓練標本の分布を p_{train} , テスト標本の分布を p_{test} , テスト標本における各クラスの訓練標本の分布の混合 比を π , 混合分布を q_{π} とする。二値分類を考えると,

$$q_{\pi} = \pi p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|y=+1) + (1-\pi)p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|y=-1)$$
(1)

となる。いま, エネルギー距離の二乗は,

$$D_{\mathrm{E}}^{2}(p_{\mathrm{test}}, q_{\pi}) = 2\mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\mathrm{test}}, \mathbf{x} \sim q_{\pi}}[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}', \tilde{\mathbf{x}}' \sim p_{\mathrm{test}}}[||\mathbf{x}' - \tilde{\mathbf{x}}'||] - \mathbb{E}_{\mathbf{x}, \tilde{\mathbf{x}} \sim q_{\pi}}[||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||]$$
(2)

である。ここで,

$$A_{y,\tilde{y}} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x} \sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|y), \ \tilde{\boldsymbol{x}} \sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|\tilde{y})}[||\boldsymbol{x} - \tilde{\boldsymbol{x}}||]$$
(3)

$$b_{y} = \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}' \sim p_{\text{test}}, \, \boldsymbol{x} \sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|y)} [||\boldsymbol{x}' - \boldsymbol{x}||]$$

$$\tag{4}$$

とおく。式(2)の第一項は,

$$\begin{split} \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \ \mathbf{x} \sim q_{\pi}} \big[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}|| \big] &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}} \big[\mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim q_{\pi}} \big[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}|| \big] \big] \\ &= \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}} \big[\pi \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1)} \big[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}|| \big] + (1 - \pi) \mathbb{E}_{\mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1)} \big[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}|| \big] \big] \\ &= \pi \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \ \mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|+1)} \big[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}|| \big] + (1 - \pi) \mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \ \mathbf{x} \sim p_{\text{train}}(\mathbf{x}|-1)} \big[||\mathbf{x}' - \mathbf{x}|| \big] \\ &= \pi b_{+1} + (1 - \pi) b_{-1} \end{split}$$

よって,

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}' \sim p_{\text{test}}, \, \mathbf{x} \sim q_{\pi}} [||\mathbf{x}' - \mathbf{x}||] = (b_{+1} - b_{-1})\pi + b_{-1} \tag{5}$$

第二項は,

$$\begin{split} \mathbb{E}_{\boldsymbol{x},\,\tilde{\boldsymbol{x}}\sim q_{\pi}}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||] &= \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim q_{\pi}}[\mathbb{E}_{\tilde{\boldsymbol{x}}\sim q_{\pi}}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||]] \\ &= \mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim q_{\pi}}\left[\pi\mathbb{E}_{\tilde{\boldsymbol{x}}\sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|+1)}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||] + (1-\pi)\mathbb{E}_{\tilde{\boldsymbol{x}}\sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|-1)[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||]}\right] \\ &= \pi\left\{\pi\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|+1),\,\,\tilde{\boldsymbol{x}}\sim p_{\text{train}}(\tilde{\boldsymbol{x}}|+1)}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||] + (1-\pi)\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|-1),\,\,\tilde{\boldsymbol{x}}\sim p_{\text{train}}(\tilde{\boldsymbol{x}}|+1)}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||] \right\} \\ &+ (1-\pi)\left\{\pi\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|+1),\,\,\tilde{\boldsymbol{x}}\sim p_{\text{train}}(\tilde{\boldsymbol{x}}|-1)}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||] + (1-\pi)\mathbb{E}_{\boldsymbol{x}\sim p_{\text{train}}(\boldsymbol{x}|-1),\,\,\tilde{\boldsymbol{x}}\sim p_{\text{train}}(\tilde{\boldsymbol{x}}|-1)}[||\boldsymbol{x}-\tilde{\boldsymbol{x}}||] \right\} \\ &= \pi^2A_{+1,+1} + \pi(1-\pi)A_{-1,+1} + (1-\pi)\pi A_{+1,-1} + (1-\pi)^2A_{-1,-1} \\ &= (A_{+1,+1}-A_{-1,+1}-A_{+1,-1}+A_{-1,-1})\pi^2 + (A_{-1,+1}+A_{+1,-1}-2A_{-1,-1})\pi + A_{-1,-1} \end{split}$$

ここで、 $A_{+1,-1} = A_{-1,+1}$ から、

$$\mathbb{E}_{\mathbf{x}, \, \tilde{\mathbf{x}} \sim q_{\pi}}[||\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}||] = (-2A_{+1,-1} + A_{+1,+1} + A_{-1,-1})\pi^2 + 2(A_{+1,-1} - A_{-1,-1})\pi + A_{-1,-1}$$
(6)

式(2)に式(5),(6)を代入して,

$$\begin{split} J(\pi) &= 2\{(b_{+1} - b_{-1})\pi + b_{-1}\} - \mathbb{E}_{\mathbf{x}',\ \tilde{\mathbf{x}}' \sim p_{\text{test}}} \big[||\mathbf{x}' - \tilde{\mathbf{x}}'|| \big] \\ &- \big\{ (-2A_{+1,-1} + A_{+1,+1} + A_{-1,-1})\pi^2 + 2(A_{+1,-1} - A_{-1,-1})\pi + A_{-1,-1} \big\} \\ &= (2A_{+1,-1} - A_{+1,+1} - A_{-1,-1})\pi^2 - 2(A_{+1,-1} - A_{-1,-1} - b_{+1} + b_{-1})\pi \\ &+ \big\{ 2b_{-1} - A_{-1,-1} - \mathbb{E}_{\mathbf{x}',\ \tilde{\mathbf{x}}' \sim p_{\text{test}}} \big[||\mathbf{x}' - \tilde{\mathbf{x}}'|| \big] \big\} \end{split}$$

となる。