Machine Learning Techniques HW#2

By b07902055 謝宗晅

Descent Methods for Probabilistic SVM

1.

將題目的 notation 代入式子之後偏微分：

$$
\begin{aligned}
F(A,B) &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\ln\left(1+\exp\left(-y_n\left(A\cdot z_n+B\right)\right)\right)\\
\implies \nabla F(A,B) &= \left(\frac{\partial F}{\partial A},\frac{\partial F}{\partial B}\right)\\
\frac{\partial F}{\partial A} &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\exp(-y_n(A\cdot z_n+B))(-y_nz_n)}{1+\exp(-y_n(A\cdot z_n+B))}\right)\\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}-y_np_nz_n\\
\frac{\partial F}{\partial B} &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\frac{\exp(-y_n(A\cdot z_n+B))(-y_n)}{1+\exp(-y_n(A\cdot z_n+B))}\right)\\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}-y_np_n
\end{aligned}
$$

因此他的 gradient 就是：

$$
\nabla F(A,B) = \left(\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}-y_np_nz_n,\ \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}-y_np_n\right)
$$

2.

因為在 y_n, p_n, z_n 之中，只有 p_n 是和 A, B 有關的，因此我們將 p_n 分別對 A, B 偏微分看看：
先將 p_n 化簡成相對比較好微分的形式：

$$
p_n = 1-\frac{1}{1+\exp(-y_n(Az_n+B))}
$$

接著就開始偏微分：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial p_n}{\partial A} &= -\left(-\frac{\exp(-y_n(Az_n+B))(-y_n z_n)}{(1+\exp(-y_n(Az_n+B)))^2} \right) \\
&= \frac{-p_n y_n z_n}{1+\exp(-y_n(Az_n+B))} \\
&= -p_n y_n z_n (1-p_n)
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial p_n}{\partial B} &= -\left(-\frac{\exp(-y_n(Az_n+B))(-y_n)}{(1+\exp(-y_n(Az_n+B)))^2} \right) \\
&= \frac{-p_n y_n}{1+\exp(-y_n(Az_n+B))} \\
&= -p_n y_n (1-p_n)
\end{aligned}
$$

接著我們來計算 Hessian 矩陣：

$$
\begin{aligned}
H(F) &= \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 F}{\partial A^2} & \frac{\partial^2 F}{\partial A \partial B} \\ \\ \frac{\partial^2 F}{\partial B \partial A} & \frac{\partial^2 F}{\partial B^2} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} p_n(1-p_n)(y_n z_n)^2 & \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} p_n(1-p_n)(y_n)^2 z_n \\ \\ \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} p_n(1-p_n)(y_n)^2 z_n & \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} p_n(1-p_n)(y_n)^2 \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

3.

對於任意的 $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^2$ 如果以下的式子成立的話，那麼 $H(F)$ 就是一個半正定矩陣：

$$
\mathbf{x}^T H \mathbf{x} \geq 0
$$

令

$$
\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}
$$

則

$$
\begin{aligned}
\mathbf{x}^T H \mathbf{x} &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \bigg(p_n(1-p_n) \bigg) \bigg(x_1^2 (y_n z_n)^2 + x_1 x_2 (y_n)^2 (2z_n) + x_2^2 (y_n)^2 \bigg) \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \bigg(p_n(1-p_n)(y_n)^2 \bigg) \bigg((x_1 z_n)^2 + 2(x_1 z_n) x_2 + x_2^2 \bigg) \\
&= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} \bigg(y_n^2 p_n (1-p_n) \bigg) \bigg(x_1 z_n + x_2 \bigg)^2 \geq 0
\end{aligned}
$$

因為式子中的 p_n 的範圍是 $0 < p_n < 1 \;\; (0 < \theta(s) < 1,\ \forall s \in \mathbb{R})$，所以 $p_n(1-p_n) > 0$，式子的其他部份都是平方項，因此一定大於等於 0，得證 $H(F)$ 是一個半正定矩陣。

Neural Network

4.

令 $x_0 = +1$，且

$$w_i = \begin{cases} d-1 & \text{if } i = 0 \\ +1 & \text{else} \end{cases}$$

則

$$g_A(\mathbf{x}) = \text{sign}\left(\sum_{i=0}^{d} w_i x_i\right)$$

就會是 $\text{OR}(x_1, x_2, \cdots, x_d)$，因為只有當 $-1 = x_1 = x_2 = \cdots = x_d$ 時，才會使得 $g_A(\mathbf{x}) = -1$
(可以簡單的從 $d - 1 + (d \times -1) < 0$ 得知)
而且只要有至少一個 x_i 是 $+1, \text{True}$ 的話，就會使得 $g_A(\mathbf{x}) = +1$，因為

$$d - 1 + (-1)(d-k) + 1(k) = 2k - 1 > 0,\ \ \forall k \in \mathbb{N},\ k > 0$$

因此這是可以實作 $\text{OR}(x_1, x_2, \cdots, x_d)$ 的方法之一。

5.

題目要求我們列出所有為 0 的 gradient component，根據投影片，我們有以下的關係式：

$$\text{Error} = E = (y - \text{NNET}(\mathbf{x}))^2 = (y - \tanh(s_1^{(L)}))^2$$

先看看 output layer 的偏微分：$(0 \le i \le d^{(L-1)})$

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{i1}^{(L)}} &= \frac{\partial E}{\partial s_1^{(L)}} \cdot \frac{\partial s_1^{(L)}}{\partial w_{i1}^{(L)}} \\ &= -2\left(\text{sech}^2\left(s_1^{(L)}\right)\right)\left(y - \tanh\left(s_1^{(L)}\right)\right) \cdot \left(x_i^{(L-1)}\right) \\ &= \begin{cases} -2\left(\text{sech}^2\left(s_1^{(L)}\right)\right)\left(y - \tanh\left(s_1^{(L)}\right)\right) & \text{, if } i = 0 \\ 0 \quad (\text{ since all } x_i^{(L-1)} = 0 \text{ where } i \neq 0\ ) & \text{, if } i \neq 0 \end{cases} \end{aligned}$$

$$\implies \frac{\partial E}{\partial w_{01}^{(L)}} \neq 0$$

再來看看其他 l 的情況：
$(1 \le l < L, 0 \le i \le d^{(l-1)}, 0 \le j \le d^{(l)})$

$$\begin{aligned}\frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(l)}} &= \frac{\partial E}{\partial s_j^{(l)}} \cdot \frac{\partial s_j^{(l)}}{\partial w_{ij}^{(l)}} \\ &= \delta_j^{(l)} \cdot \left(x_i^{(l-1)}\right) \\ \text{where } \delta_j^{(l)} &= \frac{\partial E}{\partial s_j^{(l)}}\end{aligned}$$

根據投影片的推導，我們有下列的式子：

$$\begin{aligned}\delta_j^{(l)} = \frac{\partial E}{\partial s_j^{(l)}} &= \sum_{k=1}^{d^{(l+1)}} \frac{\partial E}{\partial s_k^{(l+1)}} \frac{\partial s_k^{(l+1)}}{\partial x_j^{(l)}} \frac{\partial x_j^{(l)}}{\partial s_j^{(l)}} \\ &= \sum_{k=1}^{d^{(l+1)}} (\delta_k^{(l+1)})(w_{jk}^{(l+1)})(\operatorname{sech}^2(s_j^{(l)})) \\ &= \sum_{k=1}^{d^{(l+1)}} (\delta_k^{(l+1)})(0)(\operatorname{sech}^2(s_j^{(l)})) \\ &= 0\end{aligned}$$

$$\text{since all } w_{jk}^{(l+1)} = 0 \text{ , then all } \delta_j^{(l)} = 0 \text{ , therefore all } \frac{\partial E}{\partial w_{ij}^{(l)}} = 0$$

因此所有的 gradient component 之中，只有 $\frac{\partial E}{\partial w_{01}^{(L)}} \neq 0$。

6.

依照題目的要求，這個 neural network 會是 "$12 - (d^{(1)}+1) - \cdots - (d^{(L-1)}+1) - 1$" 的一個架構，滿足

$$\sum_{l=1}^{L-1} \left(d^{(l)}+1\right) = 48$$

那麼，這個 neural network 的 number of weights 就是：

$$\begin{aligned}N(\mathbf{d}) =& 12d^{(1)} + (d^{(1)}+1)(d^{(2)}) + \cdots + (d^{(L-1)}+1) \\ =& 12d^{(1)} + d^{(1)}d^{(2)} + d^{(2)} + d^{(2)}d^{(3)} + \cdots + d^{(L-2)}d^{(L-1)} + 2d^{(L-1)} + 1\end{aligned}$$

而且一層的 hidden layer 至少要有兩個 neuron (包含了從上一層得到的輸入以及 $x_0^{(l)}$，因此每一層至少要有兩個 neuron，也就是說層數最多只有 48/2=24 層)，因此我用簡單的程式來窮舉每一 L，每一種排列可能的結果並找出最大值，code 的簡略版本如下 (完整版在 code 的資料夾裡面的 `6.py`)：

```python
# calculate number of weights
def my_func(my_list):

# recursively run through every combination of number of hidden neuron
def recursion(my_list, available, current_layer, max_layer):

max_hidden_L = 24
max_hidden_neuron = 48
my_max = 0
max_list = []
for l in range(1, max_hidden_L + 1):
    recursion([], max_hidden_neuron, 0, l)
    print(f'***** iteration: l = {l}')
    print(f'current : my_max = {my_max}, max_list = {max_list}\n')

print(f'my_max = {my_max}, max_list = {max_list}')
```

得到的答案是 `my_max = 877, max_list = [29, 19]`，

7.

對 $\mathrm{err}_n(\mathbf{w})$ 偏微分就可以得到答案：

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \mathrm{err}_n}{\partial w_i} &= \frac{\partial}{\partial w_i}\left(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)^T\left(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial w_i}\sum_{j=1}^{d}\left(x_{j,n} - \sum_{k=1}^{d} x_{k,n}(\mathbf{w}\mathbf{w}^T)_{j,k}\right)^2 \\
&= \frac{\partial}{\partial w_i}\sum_{j=1}^{d}\left(x_{j,n} - \sum_{k=1}^{d} w_j w_k x_{k,n}\right)^2 \\
&\Rightarrow \begin{cases} 2\left(x_{i,n} - \sum_{k=1}^{d} w_i w_k x_{k,n}\right)\left(-2w_i x_{i,n} - \sum_{k\neq i} w_k x_{k,n}\right) & \text{, if } j = i \\ 2\left(x_{j,n} - \sum_{k=1}^{d} w_j w_k x_{k,n}\right)\left(-w_j x_{i,n}\right) & \text{, if } j \neq i \end{cases} \\
&= \sum_{j=1}^{d}\left(2\left(x_{j,n} - \sum_{k=1}^{d} w_j w_k x_{k,n}\right)\left(-w_j x_{i,n}\right)\right) + 2\left(x_{i,n} - \sum_{k=1}^{d} w_i w_k x_{k,n}\right)\left(-w_i x_{i,n} - \sum_{k\neq i} w_k x_{k,n}\right) \\
&= \sum_{j=1}^{d}\left(2\left(x_{j,n} - \sum_{k=1}^{d} w_j w_k x_{k,n}\right)\left(-w_j x_{i,n}\right)\right) + 2\left(x_{i,n} - \sum_{k=1}^{d} w_i w_k x_{k,n}\right)\left(-\sum_{k=1}^{d} w_k x_{k,n}\right) \\
&= -2\mathbf{w}^T\left(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)(\mathbf{x}_n)_i - 2(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\mathbf{x}_n)_i + 2(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n)(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n)\mathbf{w}_i \\
&= \left(2\mathbf{w}^T\mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n - 4\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)(\mathbf{x}_n)_i + 2(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n)(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n)\mathbf{w}_i \\
\Longrightarrow \nabla_{\mathbf{w}}\mathrm{err}_n(\mathbf{w}) &= \left(2\mathbf{w}^T\mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n - 4\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)\mathbf{x}_n + 2(\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n)^2\mathbf{w}
\end{aligned}
$$

8.

首先先將式子展開：

$$
\begin{aligned}
E_{\text{in}}(\mathbf{w}) =& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n) - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\right\|^2 \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\Big((\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n) - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big)^T\Big((\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n) - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big) \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\bigg(\Big(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\Big)^T\Big(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\Big) - 2\Big(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\Big)^T\Big(\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big)\bigg) \\
&+ \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\Big(\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big)^T\Big(\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big) \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\bigg(\Big\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\Big\|^2 - 2\Big(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\Big)^T\Big(\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big) + \Big\|\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\Big\|^2\bigg)
\end{aligned}
$$

接著我們計算期望值：

$$
\begin{aligned}
\mathbb{E}[E_{\text{in}}(\mathbf{w})] =& \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 - 2\left(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)^T\left(\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\right) + \left\|\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\right\|^2\right)\right] \\
=& \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2\right] - \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}2\left(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)^T\left(\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\right)\right] \\
&+ \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\right\|^2\right] \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 - \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}2\left(\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right)^T\left(\mathbf{w}\mathbf{w}^T(\mathbb{E}[\boldsymbol{\epsilon}_n])\right) \\
&+ \mathbb{E}\left[\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{w}\mathbf{w}^T\boldsymbol{\epsilon}_n\right\|^2\right] \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 - 0 \text{ (since every } \mathbb{E}[\epsilon_{i,n}] = 0 \text{)} \\
&+ \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}\left[\sum_{i=1}^{d}\sum_{j=1}^{d}\sum_{k=1}^{d}(\epsilon_{i,n}w_j w_k)^2\right] \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbb{E}\left[\sum_{j=1}^{d}\sum_{k=1}^{d}\sum_{i=1}^{d}(\epsilon_{i,n})^2(w_j w_k)^2\right] \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{j=1}^{d}\sum_{k=1}^{d}\sum_{i=1}^{d}\mathbb{E}\left[(\epsilon_{i,n})^2\right](w_j w_k)^2 \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\sum_{j=1}^{d}\sum_{k=1}^{d}(w_j w_k)^2 \text{ , since } \mathbb{E}[\epsilon^2] = 1 \\
=& \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 + \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\mathbf{w}^T\mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{w} \\
\Longrightarrow& \ \Omega(\mathbf{w}) = \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{w}\mathbf{w}^T = \left\|\mathbf{w}\mathbf{w}^T\right\|^2 \\
&\text{Assume that the problem description is with columns :} \\
&\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\left\|\mathbf{x}_n - \mathbf{w}\mathbf{w}^T\mathbf{x}_n\right\|^2 + \Omega(\mathbf{w})\right)
\end{aligned}
$$

9.

令 $\mathbf{u} = \left[w_{i,j}^{(1)}\right] = \left[u_{i,j}\right]$，Error 就可以使用類似第 7 題的 Error function 來表示：

$$
\begin{aligned}
E(\mathbf{u}) &= \left\| \mathbf{x} - \mathbf{u} \tanh(\mathbf{u}^T \mathbf{x}) \right\|^2 \\
&= \left(\mathbf{x} - \mathbf{u} \tanh(\mathbf{u}^T \mathbf{x}) \right)^T \left(\mathbf{x} - \mathbf{u} \tanh(\mathbf{u}^T \mathbf{x}) \right) \\
&= \sum_{k=1}^{d} \left(x_k - (\mathbf{u} \tanh(\mathbf{u}^T \mathbf{x}))_k \right)^2 \\
&= \sum_{k=1}^{d} \left(x_k - \left(\sum_{t=1}^{\tilde{d}} u_{k,t} \ \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} (\mathbf{u}^T)_{t,s} x_k \right) \right) \right)^2 \\
&= \sum_{k=1}^{d} \left(x_k - \left(\sum_{t=1}^{\tilde{d}} u_{k,t} \ \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,t} x_k \right) \right) \right)^2
\end{aligned}
$$

10.

第 9 題的 error function 對於 $u_{i,j}$ 的偏微分：
先令：

$$
D_{9,k}(\mathbf{u}) = \left(x_k - \left(\sum_{t=1}^{\tilde{d}} u_{k,t} \ \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,t} x_k \right) \right) \right)
$$

則

$$
\frac{\partial E_9(\mathbf{u})}{\partial u_{i,j}} = \sum_{k=1}^{d} \left(2 \cdot D_{9,k}(\mathbf{u}) \left(\frac{\partial D_9(\mathbf{u})}{\partial u_{i,j}} \right) \right)
$$

其中

$$
\frac{\partial D_{9,k}(\mathbf{u})}{\partial u_{i,j}} = \begin{cases} -\left(\tanh\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k \right) + u_{i,j} x_k \ \mathrm{sech}^2\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k \right) \right) & \text{if } k = i \\ -\left(u_{k,j} x_k \ \mathrm{sech}^2\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k \right) \right) & \text{if } k \neq i \end{cases}
$$

$$
\begin{aligned}
\implies \frac{\partial E_9(\mathbf{u})}{\partial u_{i,j}} = \sum_{k=1}^{d} \left(2 \cdot D_{9,k}(\mathbf{u}) \left(- u_{k,j} x_k \ \mathrm{sech}^2\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k \right) \right) \right) \\
- 2 \cdot D_{9,i}(\mathbf{u}) \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k \right)
\end{aligned}
$$

接著看看第 10 題的 error function 對於 $w_{i,j}^{(1)}$ 和 $w_{j,i}^{(2)}$ 的偏微分：
令

$$
D_{10,k}(\mathbf{w}) = \left(x_k - \left(\sum_{t=1}^{\tilde{d}} w_{t,k}^{(2)} \ \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} w_{s,t}^{(1)} x_k \right) \right) \right)
$$

且

$$E_{10}(\mathbf{w}) = \sum_{k=1}^{d}\left(x_k - \left(\sum_{t=1}^{\tilde{d}} w_{t,k}^{(2)} \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} w_{s,t}^{(1)} x_k\right)\right)\right)^2$$

則

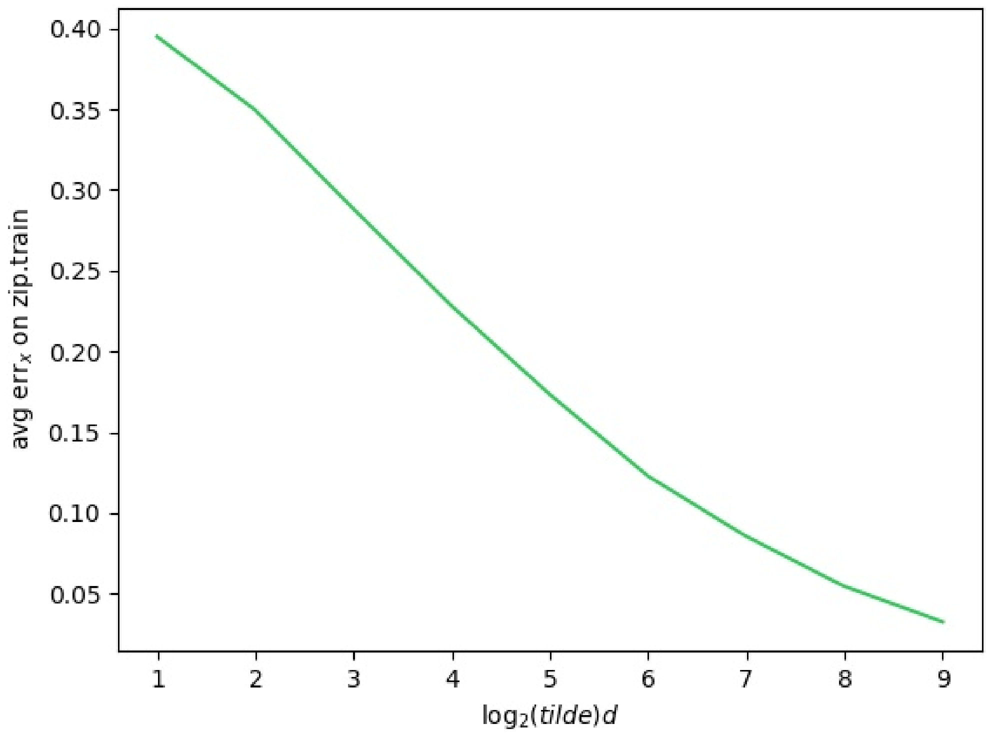
$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_{10}(\mathbf{w})}{\partial w_{i,j}^{(1)}} &= \sum_{k=1}^{d}\left(2 \cdot D_{10,k}(\mathbf{w})\left(-w_{j,k}^{(2)} x_k \operatorname{sech}^2\left(\sum_{s=1}^{d} w_{s,j}^{(1)} x_k\right)\right)\right) \\
\frac{\partial E_{10}(\mathbf{w})}{\partial w_{j,i}^{(2)}} &= 2 \cdot D_{10,i}(\mathbf{w})\left(-\tanh\left(\sum_{s=1}^{d} w_{s,j}^{(1)} x_i\right)\right) \\
&\text{(since } w_{j,i}^{(2)} \text{ appears only when } k = i)
\end{aligned}$$

因此我們可以得到以下的結果：

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial E_{10}(\mathbf{w})}{\partial w_{i,j}^{(1)}} + \frac{\partial E_{10}(\mathbf{w})}{\partial w_{j,i}^{(2)}} \\
=& \sum_{k=1}^{d}\left(2 \cdot D_{10,k}(\mathbf{w})\left(-w_{j,k}^{(2)} x_k \operatorname{sech}^2\left(\sum_{s=1}^{d} w_{s,j}^{(1)} x_k\right)\right) - 2 \cdot D_{10,i}(\mathbf{w}) \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} w_{s,j}^{(1)} x_k\right)\right) \\
& \text{and let } w_{i,j}^{(1)} = u_{i,j} = w_{j,i}^{(2)} \text{ (then } D_{10,k}(\mathbf{w}) = D_{9,k}(\mathbf{u})\text{) :} \\
=& \sum_{k=1}^{d}\left(2 \cdot D_{9,k}(\mathbf{u})\left(-u_{k,j} x_k \operatorname{sech}^2\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k\right)\right)\right) - 2 \cdot D_{9,i}(\mathbf{u}) \tanh\left(\sum_{s=1}^{d} u_{s,j} x_k\right) \\
=& \frac{\partial E_9(\mathbf{u})}{\partial u_{i,j}}
\end{aligned}$$

以下 11 ~ 14 題為了做實驗，我都將 $\log_2 \tilde{d}$ 的範圍拉大到 9

11.



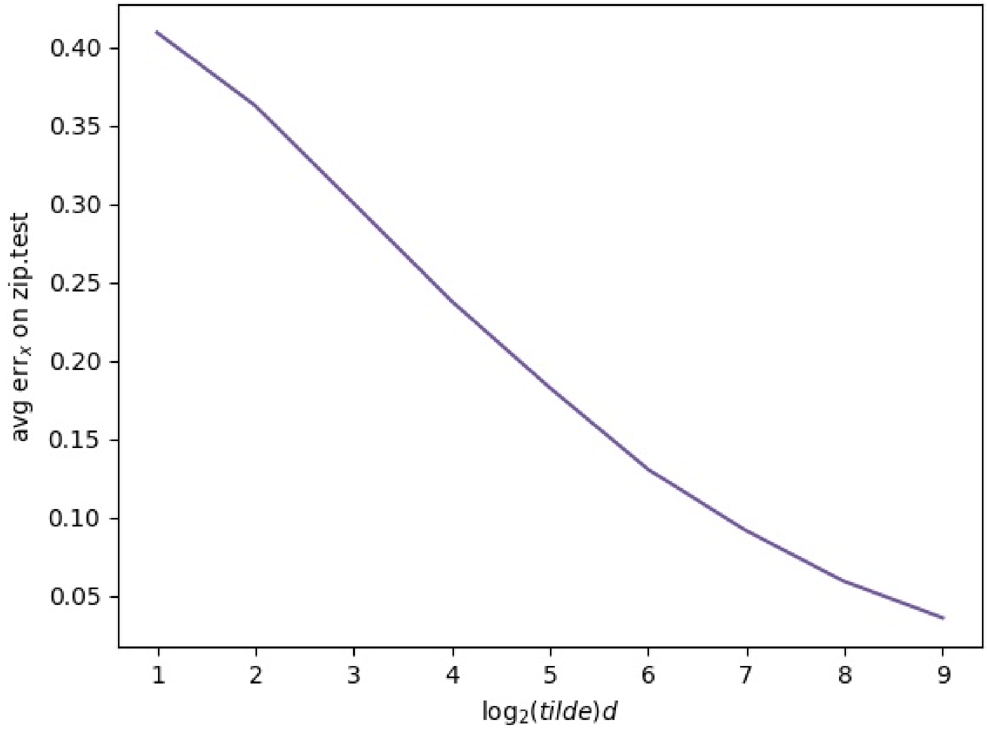
某一次數值（參考用）：

```
Ein_list: [0.3949, 0.3494, 0.2882, 0.2281, 0.1733, 0.1228, 0.0854, 0.05454, 0.03265]
```

Findings

隨著 $\tilde{d}$ 的指數型增長，E_{in} 看起來像是線性的減少，並且在 $\tilde{d}$ 越大的同時，都有更好的 E_{in}。

12.



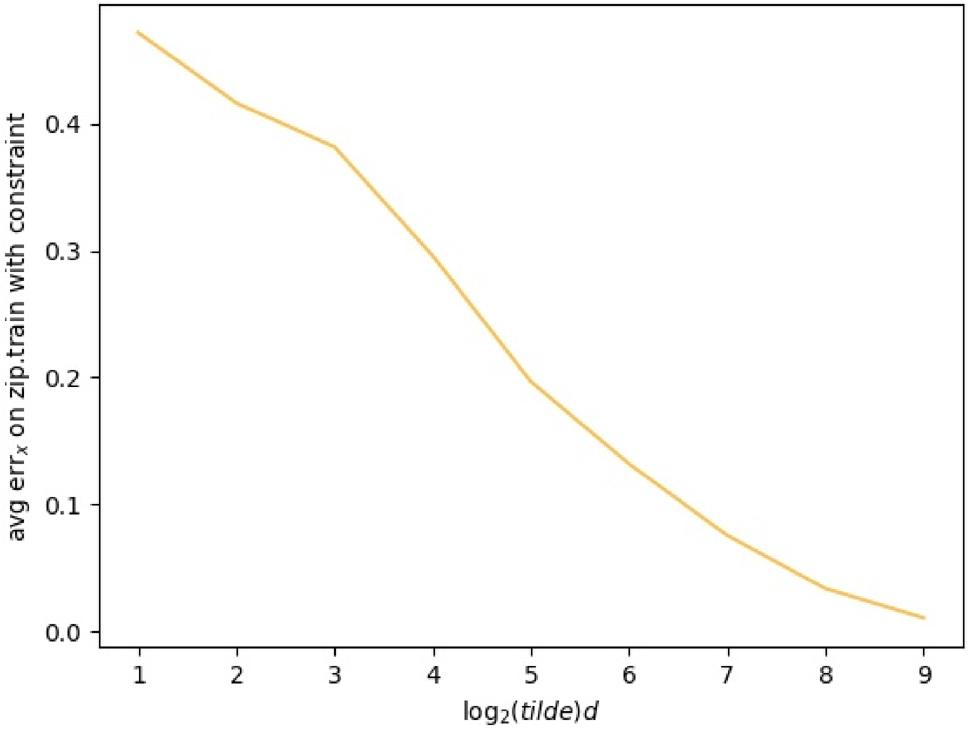
某一次數值（參考用）：

```
Eout_list: [0.4090, 0.3624, 0.3002, 0.2377, 0.1824, 0.1304, 0.0913, 0.0589, 0.0358]
```

Findings

趨勢和 11 題大致相同，而很特別的一點是，我們的 autoencoder 就算在 E_{in} 表現的很好，也完全沒有 overfitting 的情形出現。

13.



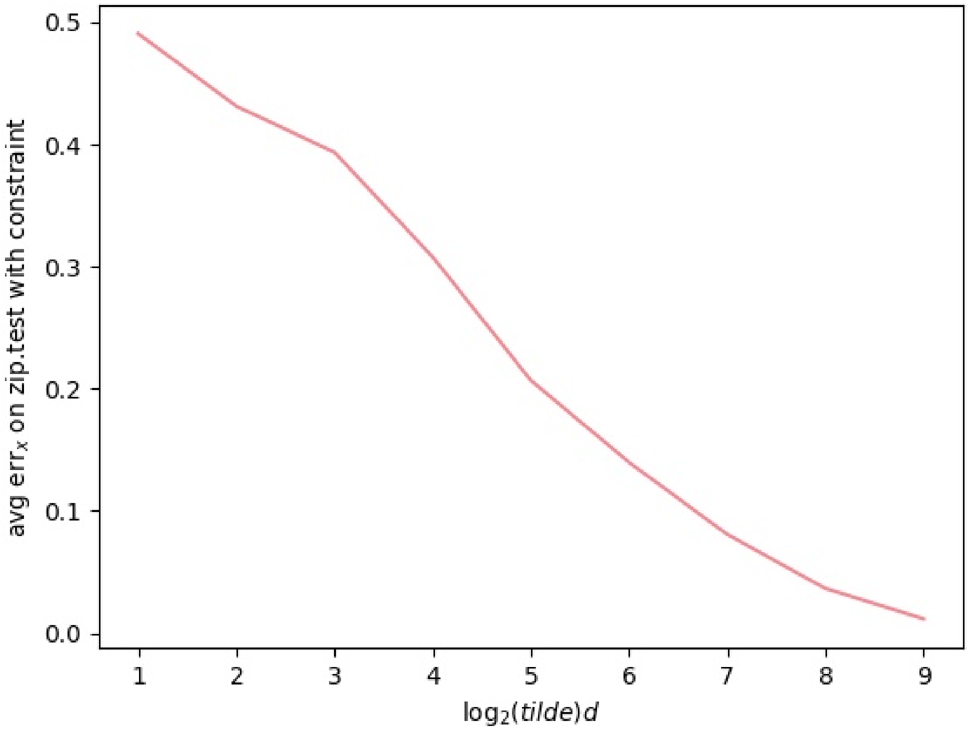
某一次數值（參考用）：

```
Ein_list: [0.4718, 0.4163, 0.3816, 0.2958, 0.1966, 0.1318, 0.0754, 0.0335, 0.0105]
```

Findings

在加上了 constraint 之後，E_{in} 的表現只有在一開始的時候表現比起沒有 constraint 的第 11 題還差一點點，在 $\tilde{d}$ 越來越大的同時，有無 constraint 對於 E_{in} 的表現就幾乎看不出差異了，不過，在 $\tilde{d} = 128$ 之後，有 constraint 的版本表現的比沒有 constraint 的版本還要來的好，不過也只有一點點差異而已，數值上大約只有 0.01~0.02 左右。

14.



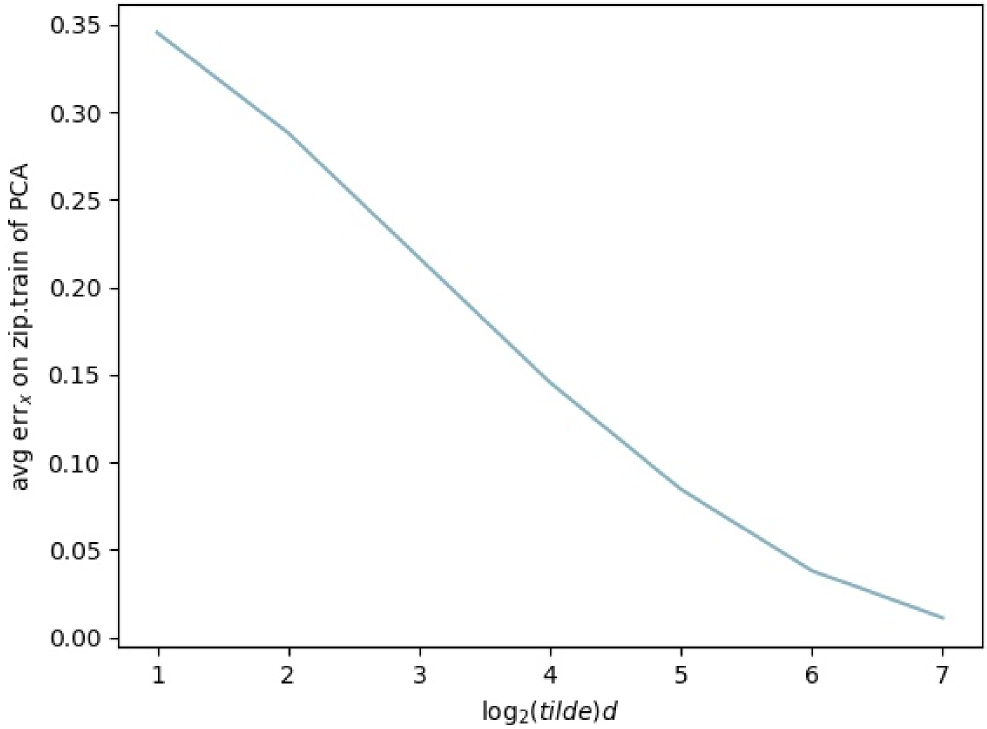
某一次的數值（參考用）：

```
Eout_list: [0.4906, 0.4313, 0.3934, 0.3077, 0.2067, 0.1396, 0.0806, 0.0363, 0.0115]
```

Findings

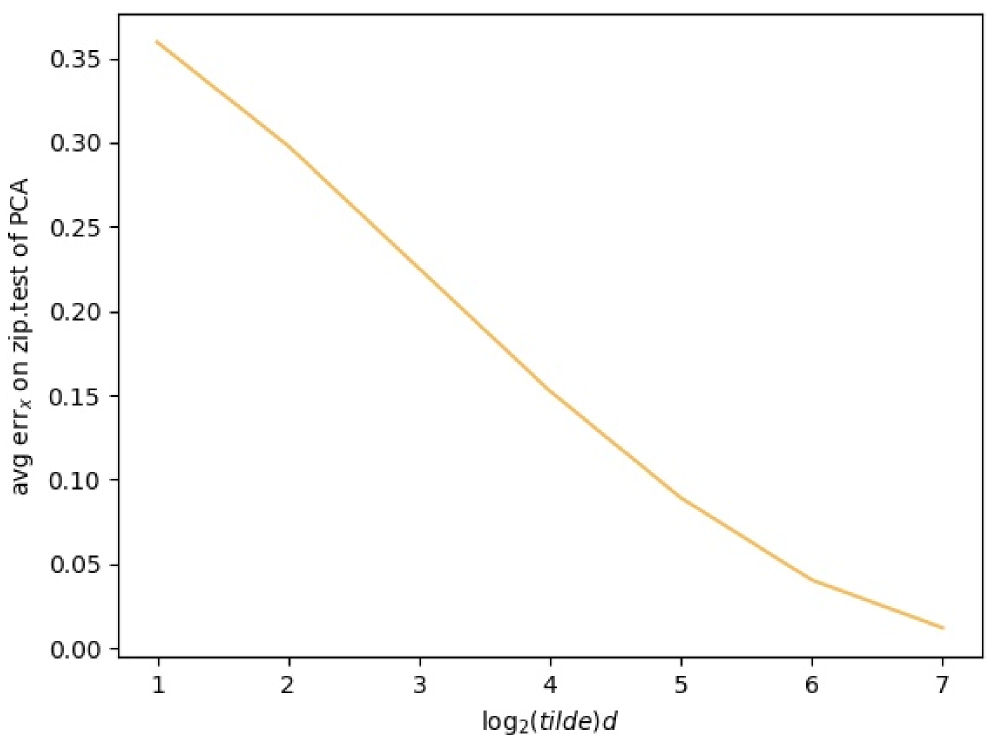
以趨勢的角度來看，這題的趨勢和第 13 題的趨勢長的幾乎一模一樣，而以 E_{out} 的比較來說，「本題和 12 題的關係」和「11 題和 13 題的的關係」幾乎是一樣的，只有在一開始的表現比起沒有 constraint 的 11 題來的差，隨著 $\tilde{d}$ 的增長，有無 constraint 的之間的差別已經幾乎看不出來；同樣的，在 $\tilde{d} = 128$ 之後，有 constraint 的表現比起沒有 constraint 來的還好一些，但數值上的差距大約只有 0.01~0.02 左右，並不是非常明顯。

15.



Findings
和前面幾題比起來，線性的 PCA 的 error 普遍比非線性的表現還要好，不論在哪一個 $\tilde{d}$，都能做出比非線性的 autoencoder 的 error 還少的結果。

16.



Findings

同樣的，線性的 PCA 也沒有 overfitting 的情況出現，E_{in} 和 E_{out} 的值並沒有差非常多，而以趨勢來看，也和 15 題的圖片非常的接近，只是數值上比 15 題還要高了一些些而已。

Bonus

17.

與 B07902028 林鶴哲討論

(為了方便輸入，我將本題的所有 Δ 都換成用 x 表示)
(因此本題的題目變成：$\text{for } x \geq 2,\ \text{ if } N \geq 3x\log_2 x,\ \ N^x + 1 < 2^N$)

我們將題目的目標改為證明以下的式子：

$$\text{for } x \geq 2, \text{ if } N \geq 3x\log_2 x, N^x + 1 < N^x + \frac{9}{16}N^x = \frac{25}{16}N^x < 2^N$$

將式子的左右邊對 2 取對數之後，就可以得到下列的式子：

$$\log_2 \frac{25}{16} + x\log_2 N < N$$

再移項之後，就可以得到下列的式子：

$$x < \frac{N - \log_2 \frac{25}{16}}{\log_2 N}$$

並且因為在 $N \geq 6$ 的情況下，$\frac{N - \log_2 \frac{25}{16}}{\log_2 N}$ 的導數都是正的：

$$\frac{d}{dN}\frac{N - \log_2 \frac{25}{16}}{\log_2 N} = \frac{\log_2 N - N \cdot \frac{1}{N}\frac{1}{\ln 2}}{(\log_2 N)^2} = \frac{\log_2 N - \frac{1}{\ln 2}}{(\log_2 N)^2} > 0 \text{ for } N \geq 6$$

因此，我們只要證明以下的式子：

$$x < \frac{3x\log_2 x - \log_2 \frac{25}{16}}{\log_2(3x\log_2 x)}$$

就能夠保證對於一個 x，$x < \frac{N - \log_2 \frac{25}{16}}{\log_2 N}$ 會成立。我們再把式子移項，就可以得到下列的結果：

$$1 < \frac{1}{x} \cdot \frac{3x\log_2 x - \log_2 \frac{25}{16}}{\log_2(3x\log_2 x)} = \frac{3\log_2 x - \frac{\log_2 \frac{25}{16}}{x}}{\log_2(3x\log_2 x)}$$

and

$$\frac{3\log_2 x - \frac{\log_2 \frac{25}{16}}{x}}{\log_2(3x\log_2 x)} \geq \frac{3\log_2 x - \frac{\log_2 \frac{25}{16}}{2}}{\log_2(3x\log_2 x)} = \frac{3\log_2 x - \log_2 \frac{5}{4}}{\log_2(3x\log_2 x)} = \frac{\log_2(x^3 \cdot \frac{5}{4})}{\log_2(3x\log_2 x)}$$

where

$$x^2 > \frac{12}{5}\log_2 x,\ \ \text{since for } x \geq 2,\ \frac{dx^2}{dx} = 2x > \frac{12}{5x}\frac{1}{\ln 2} = \frac{d}{dx}\frac{12}{5}\log_2 x,\ \ \text{and } 4 \geq \frac{12}{5}\log_2 x$$

$$\Rightarrow \log_2(x^3 \cdot \frac{5}{4}) > \log_2(3x\log_2 x)$$

$$\Rightarrow \frac{\log_2(x^3 \cdot \frac{5}{4})}{\log_2(3x\log_2 x)} > 1$$

$$\Longrightarrow \frac{3\log_2 x - \frac{\log_2 \frac{25}{16}}{x}}{\log_2(3x\log_2 x)} \geq \frac{\log_2(x^3 \cdot \frac{5}{4})}{\log_2(3x\log_2 x)} > 1$$

因此我們得到了證明的結果：

$$\text{for } x \geq 2, N \geq 3x\log_2 x,\ \ N^x + 1 < \frac{25}{16}N^x < 2^N$$

18.

因為到 output layer 的 $\mathbf{w}^{(2)}$ 是固定的，所以我們要考慮的 VC dimension 只要考慮到第一層 ($d+1$ 維到 3 維) 的所有可能就好了。因為本題的 transformation function 都是 sign function，所以第二層 (3 個 neuron 的) 的每一個 neuron 都可以當作是一個將 $d+1$ 維輸入，變為 1 維輸出的 perceptron，而在機器學習基石有提過，一個 $d+1$ 維 (要加上常數項) 的 perceptron 的 breakpoint 是 $d+2$，並且機器學習基石也有講過一個 bounding function $B(N,k)$，是用來表示一個 breakpoint 為 k，有 N 筆資料所能做出的最大組合數：

$$B(N,k) \leq \underbrace{\sum_{i=0}^{k-1}\binom{N}{i}}_{\text{highest term } N^{k-1}}$$

(<取自機器學習基石的投影片)

所以我們將 breakpoint = $d+2$ 帶入式子，就可以得到以下的式子：

$$B(N, d+2) \leq \sum_{i=1}^{d+1}\binom{N}{i}$$

而因為 (證明在本題作答的最後 [1])

$$\sum_{i=1}^{D}\binom{N}{i} \leq N^D + 1$$

所以我們有：

$$B(N,d+2) \le \sum_{i=1}^{d+1} \binom{N}{i} \le N^{d+1} + 1$$

並且因為在第二層有三個 neuron，所以所有的組合數就是：

$$\begin{aligned}(B(N,d+2))^3 &\le (N^{d+1}+1)^3 \\ &= N^{3(d+1)} + 3N^{2(d+1)} + 3N^{(d+1)} + 1\end{aligned}$$

和 17 題作結合，令 $3(d+1)+1 = x \ge 4 \ge 2$ 和 $N \ge 3x\log_2 x \ge 24$ 則：

$$N^{3(d+1)} + 3N^{2(d+1)} + 3N^{(d+1)} + 1 \le 3N^{3(d+1)} + 1 \le N \cdot N^{3(d+1)} \le N^{3(d+1)+1}$$

我們就有以下的結果：

$$(B(N,d+2))^3 \le N^{3(d+1)+1} + 1 < 2^N$$

也就是說 $\mathcal{H}_{3A}$ 不可能 shatter N 個點，因此 $\mathcal{H}_{3A}$ 的

$$d_{VC} < 3x\log_2 x = 3(3(d+1)+1)\log_2(3(d+1)+1)$$

證明 [1]：

$$\sum_{i=1}^{D} \binom{N}{i} \le N^D + 1$$

使用數學歸納法來證明，當 $D=0$ 時，原式成立：

$$1 \le 1+1 = 2$$

假設當 $D=k$ 時成立，則 $D=k+1$ 時也會成立：

$$\begin{aligned}\binom{N}{k+1} + \sum_{i=1}^{k} \binom{N}{i} &\le \binom{N}{k+1} + N^k + 1 \\ &= \frac{N(N-1)\cdots(N-k)}{(k+1)!} + N^k + 1 \\ &\le N(N-1)\cdots(N-k) + N^k + 1 \\ &\le (N-1)N^k + N^k + 1 \\ &= N \cdot N^k + 1 \\ &= N^{k+1} + 1\end{aligned}$$

因此我們得到了證明。