第２回レポート課題

演習問題１～６から２題以上選んで解答する.

演習問題 1. データ $Y_i, i = 1, \dots, n$ は

$$Y_i = \phi(x_i)^T\theta + \varepsilon_i,\ i = 1, \dots, n, \quad \varepsilon_1 \dots, \varepsilon_n \sim_{i.i.d.} N(0, \sigma^2)$$

で定まる分布にしたがうとする．ここで，入力 $x_1, \dots, x_n$ は定数,
また $\phi(x), \theta \in \mathbb{R}^d$ とする．$n \times d$ 行列 Φ を

$$\Phi = (\phi(x_1), \dots, \phi(x_n))^T$$

とし，Φ のランクは d とする．パラメータ θ の最小２乗推定量を $\widehat{\theta}$ とする．ここで，点 x における関数値を $\widehat{Y}(x) = \phi(x)^T\widehat{\theta}$ で予測するとき，$\widehat{Y}(x)$ の分散を求めよ.

注：データの Y_i が確率変数なので $\widehat{\theta}$ も確率変数となる．$\widehat{\theta}$ の分散共分散行列から $\widehat{Y}(x)$ の分散が計算できる.

演習問題 **2.** 線形独立なベクトル $a_1, \ldots, a_d \in \mathbb{R}^n$ に対して $n \times d$ 行列を $\Phi = (a_1, \ldots, a_d)$ と定める．n 次正方行列 Π を $\Pi = \Phi(\Phi^T\Phi)^{-1}\Phi^T$ とする.

1. $\mathrm{trace}(\Pi)$ を求めよ.

2. $x \in \mathrm{span}\{a_1, \ldots, a_d\}$ のとき $\Pi x = x$ となることを示せ.

3. $x \in \mathbb{R}^n$ に対して Πx と $(I - \Pi)x$ は直交することを示せ.

4. Π の固有値と重複度(固有空間の次元)を求めよ.

演習問題 **3.** $\mathcal{H}$ を **RKHS** とし，$k(x, x')$ をカーネル関数とする.
データ $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ に対して関数 $f \in \mathcal{H}$ を以下のようにフィッティングする.

$$\min_{f \in \mathcal{H}} \sum_{i=1}^{n} (y_i - f(x_i))^2 + \lambda \|f\|_{\mathcal{H}}^2$$

上式の解を求めよ．ただし $\|f\|_{\mathcal{H}}$ は f の **RKHS** ノルム，$\lambda > 0$ とする．ベクトルや行列を適当に定義して，解を簡潔に表すこと.

演習問題 **4.** 正定値カーネル $k(x, x')$ から定義される**RKHS**を $(\mathcal{H}, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ とし，積から定まるノルムを $\| \cdot \|$ とする．点 $x_1, \ldots, x_n$ に対して

$$\min_{f \in \mathcal{H}} \sum_{i=1}^{n} \|f - k(x_i, \cdot)\|^2$$

の最適解を求めよ．

演習問題 **5.** $x, t \geq 0$ に対して定義される実数値関数 $f(x, t)$ に対して，次の積分値が定まるとする．

$$k(x, y) = \int_0^\infty f(x, t) f(y, t) dt.$$

1. $k(x, y)$ は正定値カーネルであることを示せ．

2. $x, y \geq 0$ に対して $\min\{x, y\}$ は正定値カーネルであることを示せ．

演習問題 **6.** データ $(x_1, y_1), \ldots (x_n, y_n) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}$ に対して線形モデル $y_i = \theta_0 + \theta_1 x_i + \varepsilon_i$ をあてはめるとき，最小２乗推定量を $\widehat{\theta}_0, \widehat{\theta}_1$ とする.

一方，$a, b \in \mathbb{R}$ を定数として，データ $(\widetilde{x}_i, \widetilde{y}_i) = (x_i + a, y_i + b)$, $i = 1, \ldots, n$ に対して線形モデル $\widetilde{y}_i = \theta_0 + \theta_1 \widetilde{x}_i + \widetilde{\varepsilon}_i$ をあてはめるとき，最小２乗推定量を $\widetilde{\theta}_0, \widetilde{\theta}_1$ とする.

$(\widehat{\theta}_0, \widehat{\theta}_1)$ と $(\widetilde{\theta}_0, \widetilde{\theta}_1)$ の関係について調べよ.