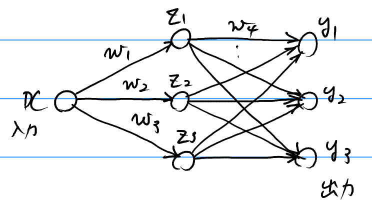
5.40

・ニューラルネットワークの出力ユニットの活性化関数をソフトマックス関数とする。
・目標変数 $\mathbf{t}$ の条件付分布を多項分布とし、ニューラルネットの出力をこの多項分布の平均と解釈する。
というモデルを考える



出力ユニット y_k の活性を a_k とすると

$$y_k(\mathbf{x}, \mathbf{w}) = \frac{\exp(a_k(\mathbf{x}, \mathbf{w}))}{\sum_j \exp(a_j(\mathbf{x}, \mathbf{w}))}$$

目標変数 $\mathbf{t}$ (1 of K 表記)の条件付分布は

$$p(\mathbf{t} \mid \mathbf{x}, \mathbf{w}) = \prod_{k=1}^{K} y_k(\mathbf{x}, \mathbf{w})^{t_k} \quad \cdots ①$$

となる。このとき $D = \{\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2, \cdots\}$, $X = \{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \cdots\}$, $y_{nk} = y_k(\mathbf{x}_n, \mathbf{w})$ とおくと尤度は

$$p(D \mid \mathbf{w}, X) = \prod_{n=1}^{N} p(\mathbf{t}_n \mid \mathbf{x}_n, \mathbf{w}) = \prod_{n=1}^{N} \prod_{k=1}^{K} y_{nk}^{t_{nk}} \quad \cdots ②$$

対数尤度は

$$\ln p(D \mid \mathbf{w}, X) = \sum_{n=1}^{N} \sum_{k=1}^{K} t_{nk} \ln y_{nk}$$

となる。

(注) 教科書では条件付き確率の $\mathbf{x}, \mathbf{x}_n, X$ の表記は省略されている。

(パラメータwの推定)

ベイズモデルなのでwの推定値は最大事後確率推定(MAP推定)で与えられる。wの事ご分布は

$$p(w|D,X)=\frac{p(D,w|X)}{p(D|X)}=\frac{p(D|w,X)\,p(w)}{p(D|X)}\propto p(D|w,X)\,p(w)$$

D, Xは観測値に固定されているのでp(D|X)は定数である

なので対数事後分布は

$$\ln p(w|D,X)=\ln p(D|w,X)+\ln p(w)+C,\quad (Cは w によらない定数)$$

$$=\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}t_{nk}\ln y_{nk}+\ln p(w)+C$$

となる。

wの事前分布を等方ガウス分布(5.162)とすると

$$\ln p(w|D,X)=\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}t_{nk}\ln y_{nk}-\frac{\alpha}{2}w^Tw+C$$

となる。

よって、対数事ご分布$\ln p(w|D,X)$の最大化は、(5.182)の正則化ゴサ関数

$$E(w)=-\ln p(D|w,X)+\frac{\alpha}{2}w^Tw$$

$$=-\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K}t_{nk}\ln y_{nk}+\frac{\alpha}{2}w^Tw$$

の最小化と等価であることが分かる。

$E(w)$を最小にするw_{MAP}は $0=\frac{\partial E}{\partial w}$ の解で与えられる。

この解は5.2.4節の勾配降下法で得ることができる。

勾配降下法で必要な$\frac{\partial E}{\partial w}$の計算は5.3節の誤差逆伝播で行うことができる。

(予測分布)

新しいxに対するtの予測分布は

$$p(t|x,D,X)=\int p(t,w|x,D,X)\,dw=\int p(t|x,w)\,p(w|D,X)\,dw$$
$$=\int\prod_{k=1}^{K}y_k^{t_k}(x,w)\,p(w|D,X)\,dw$$

で与えられる。

このまま積分するのは難しいので近似する。

(近似1)

(5.185)と同様に事後分布を$p(w|D,X)\simeq\delta(w-w_{MAP})$と近似して

$$p(t|x,D,X)=\int\prod_{k=1}^{K}y_k^{t_k}(x,w)\,p(w|D,X)\,dw$$
$$\simeq\int\prod_{k=1}^{K}y_k^{t_k}(x,w)\,\delta(w-w_{MAP})\,dw=\prod_{k=1}^{K}y_k^{t_k}(x,w_{MAP})$$

を得る。

(近似2)

5.7.3節の(5.190)と同様の近似は出来ないことの説明

(5.186)と同様にネットワークの出力y_kの活性a_kを線形近似する

$$a_k(x,w)\simeq a_k^{MAP}(x)+b_k^T(w-w_{MAP})$$

ただし$a_k^{MAP}(x)=a_k(x,w_{MAP})$, $b_k=\nabla a_k(x,w)\Big|_{w=w_{MAP}}$とする。

このときネットワークの出力y_kは

$$y_k(x,w)\simeq\frac{\exp(a_k^{MAP}(x)+b_k^T(w-w_{MAP}))}{\sum_j\exp(a_j^{MAP}(x)+b_j^T(w-w_{MAP}))}$$

となる。

これより $\mathbf{x}$ に対して $\mathbf{t}=(0\cdots\underset{k番目}{1}\cdots0)$ となる確率密度は

$$p(\mathbf{t}=(0\cdots\underset{k番目}{\overset{\uparrow}{1}}\cdots0)|\mathbf{x},D,\mathbf{X}) = \int y_k(\mathbf{x},\mathbf{w})\,p(\mathbf{w}|D,\mathbf{X})\,d\mathbf{w}$$

a_k を線形近似

$$\simeq \int \frac{\exp\left(a_k^{MAP}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}_k^T(\mathbf{w}-\mathbf{w}_{MAP})\right)}{\sum_j \exp\left(a_j^{MAP}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}_j^T(\mathbf{w}-\mathbf{w}_{MAP})\right)}\,p(\mathbf{w}|D,\mathbf{X})\,d\mathbf{w}$$

$p(\mathbf{w}|D,\mathbf{X})$ のラプラス近似

$$\simeq \int \underbrace{\frac{\exp\left(a_k^{MAP}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}_k^T(\mathbf{w}-\mathbf{w}_{MAP})\right)}{\sum_j \exp\left(a_j^{MAP}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}_j^T(\mathbf{w}-\mathbf{w}_{MAP})\right)}}_{③}\,q(\mathbf{w}|D,\mathbf{X})\,d\mathbf{w}$$

となる。

③ が $\mathbf{w}^T\mathbf{b}_k$ を変数とするシグモイド関数になっていないので、(4.145)と同じ形と見なせない。
よって4.5.2節の結果を利用して積分を得ることができない。

5.7.3節では、③の部分が $\sigma\left(a^{MAP}(\mathbf{x}) + \mathbf{b}^T(\mathbf{w}-\mathbf{w}_{MAP})\right)$ となっていたので
4.5.2節の(4.145)の積分と同じ形と見なすことができ、
(4.148)、(4.150)、(4.153)を用いて(5.190)の積分を得ることができた。

(超パラメータαの推定)

αのエビデンス関数は

$$p(D|\alpha,X)=\int p(D|w,X)\,p(w|\alpha)\,dw$$

である。右辺の $f(w)=p(D|w,X)\,p(w|\alpha)$ をラプラス近似する。

・根拠はない
ラプラス近似がよい近似になると仮定してるだけ。

このとき、(4.135) より

$$p(D|\alpha,X)=\int f(w)\,dw \simeq f(w_{MAP})\frac{(2\pi)^{\frac{W}{2}}}{|A|^{\frac{1}{2}}}$$

となる。ただし W は w の次元で、$A=-\nabla\nabla \ln f(w)\big|_{w=w_{MAP}}$ (4.132) である。

よって

$$\ln p(D|\alpha,X)=\ln f(w_{MAP})+\frac{W}{2}\ln(2\pi)-\frac{1}{2}\ln|A|$$

ここで

$$\begin{aligned}
\ln f(w_{MAP}) &= \ln p(D|w_{MAP},X)+\ln p(w_{MAP}|\alpha) \\
&= \underbrace{-E(w_{MAP})+\frac{\alpha}{2}w_{MAP}^T w_{MAP}}_{\text{上記 }E(w)\text{ より}} + \underbrace{\ln N(w_{MAP}|0,\alpha^{-1}I)}_{(5.162)} \\
&= -E(w_{MAP})+\frac{\alpha}{2}w_{MAP}^T w_{MAP} + \ln \frac{1}{|2\pi|^{\frac{W}{2}}}\frac{1}{|\alpha^{-1}I|^{\frac{1}{2}}}\exp\left(-\frac{\alpha}{2}w_{MAP}^T w_{MAP}\right) \\
&= -E(w_{MAP})-\frac{W}{2}\ln(2\pi)+\frac{W}{2}\ln\alpha \quad \leftarrow |\alpha^{-1}I|=\alpha^{-W}
\end{aligned}$$

なので

$$\ln p(D|\alpha,X)=-E(w_{MAP})-\frac{1}{2}\ln|A|+\frac{W}{2}\ln\alpha$$

を得る。

これを最大化する α は

$$0 = \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln p(D|\alpha, X) = \frac{\partial}{\partial \alpha}\left(-E(w_{MAP}) - \frac{1}{2}\ln|A| + \frac{W}{2}\ln\alpha\right)$$

$$= -\frac{1}{2} w_{MAP}^T w_{MAP} - \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial \alpha}\ln|A| + \frac{W}{2\alpha}$$

上記 $E(w) = -\sum_{n=1}^{N}\sum_{k=1}^{K} t_{nk}\ln y_{nk} + \frac{\alpha}{2} w^T w$ より

$$\frac{\partial E(w_{MAP})}{\partial \alpha} = \frac{1}{2} w_{MAP}^T w_{MAP}$$

で与えられる。ここで

$$A = -\nabla\nabla \ln f(w)\Big|_{w=w_{MAP}} = -\nabla\nabla \ln p(D|w, X)\Big|_{w=w_{MAP}} - \nabla\nabla \ln p(w|\alpha)\Big|_{w=w_{MAP}}$$

$$= H + \alpha I$$

$$-\nabla\nabla \ln p(w|\alpha) = -\nabla\nabla \ln N(w|0, \alpha^{-1} I)$$
$$= -\nabla\nabla\left(-\frac{\alpha}{2} w^T w\right) = \alpha I$$

$$\frac{\partial w^T w}{\partial w} = \frac{\partial Tr(w^T I w)}{\partial w}$$
$$= \left(\frac{\partial Tr(w^T I w)}{\partial w^T}\right)^T = \left(w^T(I + I^T)\right)^T \quad (C.27)$$
$$= 2w$$
$$\therefore \frac{\partial}{\partial w}\frac{\partial}{\partial w} w^T w = \frac{\partial}{\partial w} 2w$$
$$= 2\begin{pmatrix} \frac{\partial w_1}{\partial w_1} & \frac{\partial w_2}{\partial w_1} \\ \frac{\partial w_1}{\partial w_2} & \frac{\partial w_2}{\partial w_2} \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = 2I$$

である。ただし、$H = -\nabla\nabla \ln p(D|w, X)\Big|_{w=w_{MAP}}$ とする。

H の固有値を λ_i $(i = 1 \sim W)$ とすると

A の固有値は $\lambda_i + \alpha$ $(i = 1 \sim W)$ となる。

縮退してても OK? 固有値の求め方?

$$H u_i = \lambda_i u_i$$
$$(\alpha I) u_i = \alpha u_i$$
$$\therefore (H + \alpha I) u_i = (\lambda_i + \alpha) u_i$$

よって

$$\frac{\partial}{\partial \alpha}\ln|A| = \frac{\partial}{\partial \alpha}\ln\prod_{i=1}^{W}(\lambda_i + \alpha) = \frac{\partial}{\partial \alpha}\sum_{i=1}^{W}\ln(\lambda_i + \alpha) = \sum_{i=1}^{W}\frac{1}{\lambda_i + \alpha}$$

(C.47)

これを上の式に入れて

$$0 = -\frac{1}{2} w_{MAP}^T w_{MAP} - \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{W}\frac{1}{\lambda_i + \alpha} + \frac{W}{2\alpha}$$

$$\therefore \quad 0 = -\alpha w_{MAP}^T w_{MAP} - \sum_{i=1}^{W}\frac{\alpha}{\lambda_i + \alpha} + \sum_{i=1}^{W} 1$$

$$= -\alpha w_{MAP}^T w_{MAP} + \sum_{i=1}^{W}\frac{\lambda_i}{\lambda_i + \alpha}$$

$$\therefore \quad \alpha = \frac{\gamma}{w_{MAP}^T w_{MAP}} \quad \cdots (5.178)$$

を得る。ただし

$$\gamma = \sum_{i=1}^{W}\frac{\lambda_i}{\lambda_i + \alpha} \quad \cdots (5.179)$$

である。

（確率モデル図）

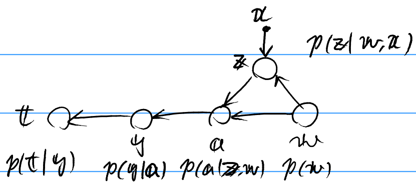
参考までに8章の確率モデル図で、この問題のモデル図を書いてみる。

なお、ニューラルネットワークは8章の確率モデル図とは別のものである。

{ ニューラルネットワークのノードは確率変数とは限らない。矢印はノード間の確率的依存関係を表現しない。
確率モデル図のノードは確率変数である。矢印はノード間の確率的依存関係を表現する。

この問題のモデルにおいて確率変数は t, t_n, w, z, y である。x の分布は考えない、x は定数としている。

t, x, y, a, z, w の確率モデル図は



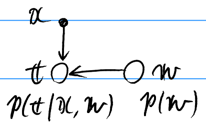
確率的依存の仕方はいくつかある（wikiより）

・確率変数変換 $y=ax+b$ とか
Transform of variable

・確率変数の関数 $z=x+y$ とか
Function of variables

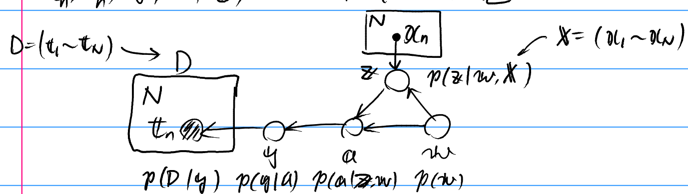
・混合（合成）分布
Compound distribution
分布のパラメータが確率変数になること
$p(y|x)=N(y|f(x),\sigma^2)$ とか
混合分布というと $p(x)=\sum_k \pi_k p_k(x)$ を指すこともある

となる。① $p(t|x,w)$ のモデル図は

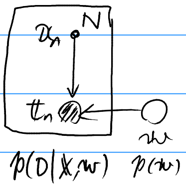


となる。

t_n, x_n, y, a, z, w の確率モデル図は

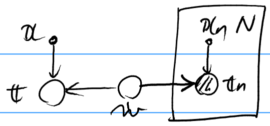


となる。② $p(D|w,X)$ のモデル図は



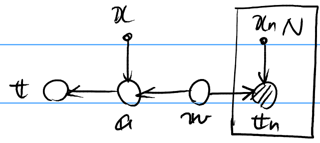
となる。

予測分布を求めるときのモデル図は

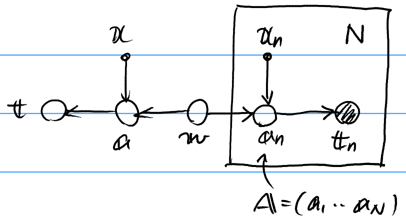


である。

失敗したが、aを線形近似して予測分布を求めるときのモデル図は



である。訓練時のa_nも含めたモデル図は



となる。