

3.3.3 の (3.78) について、確認する。

これは PRML の演習 3.16 とほぼ同一になっている。^{*1}

周辺尤度は (3.66)-(3.68) を参考にすると以下のようになる。

$$p(Y|X) = \int p(Y|X, w)p(w)dw = \int (\prod \mathcal{N}(y_n|w^T \phi(x_n), \sigma_y^2)) \mathcal{N}(w|0, \sigma_w^2 I_{H_1}) dw = \int \mathcal{N}(Y|\Phi w, \sigma_y^2 I_N) \mathcal{N}(w|0, \sigma_w^2 I_{H_1}) dw \quad (1)$$

なお、 $\Phi = \begin{pmatrix} \phi(x_1)^T \\ \vdots \\ \phi(x_N)^T \end{pmatrix}$ ($\Phi \in \mathbb{R}^{N \times H_1}$) で、 I_n は n 次元の単位ベクトル。これに関して、(A.24) を適用する。

$$p(Y|X) = \mathcal{N}(Y|0, \sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{N}{2}} |\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T|^{\frac{1}{2}}} \exp(-\frac{1}{2} Y^T (\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T)^{-1} Y) \quad (2)$$

ここで対数周辺尤度を考える。

$$\ln p(Y|X) = -\frac{N}{2} \ln(2\pi) - \frac{1}{2} \ln |\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T| - \frac{1}{2} Y^T (\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T)^{-1} Y \quad (3)$$

第 2 項は以下のようになる。

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \ln |\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T| &= -\frac{1}{2} \ln \sigma_y^{2N} |I_N + \frac{\sigma_w^2}{\sigma_y^2} \Phi \Phi^T| = -\frac{1}{2} \ln \sigma_y^{2N} \sigma_w^{2H_1} |\sigma_w^{-2} I_{H_1} + \sigma_y^{-2} \Phi^T \Phi| \\ &= -\frac{1}{2} \ln \sigma_y^{2N} \sigma_w^{2H_1} |\hat{\Sigma}^{-1}| = -\frac{1}{2} \ln \frac{\sigma_y^{2N} \sigma_w^{2H_1}}{|\hat{\Sigma}|} = -\frac{1}{2} (N \ln \sigma_y^2 + H_1 \ln \sigma_w^2 - \ln |\hat{\Sigma}|) \end{aligned} \quad (4)$$

なお、(3.72),(3.73) を Φ を使って表現すると、

$$\hat{\Sigma}^{-1} = \sigma_y^{-2} \Phi^T \Phi + \sigma_w^{-2} I_{H_1} \quad (5)$$

$$\hat{\mu} = \hat{\Sigma} \sigma_y^{-2} \Phi^T Y \quad (6)$$

この変形は一般に成立する、以下の 3 式を利用する。

$$|aA| = a^N |A| \quad (A \in \mathbb{R}^{N \times N}, a \in \mathbb{R}) \quad (7)$$

$$|A|^{-1} = \frac{1}{|A|} \quad (8)$$

$$|I_M + AB^T| = |I_N + BA^T| \quad (A, B \in \mathbb{R}^{M \times N}) \quad (9)$$

これらの式の詳細は、PRML を参照すると良い。

最初の式は PRML には明示されていないが、PRML の (C.10) の行列式の定義からわかる。

2 番目の式は PRML の (C.13) にある。一般の線形代数の教科書に証明がある (係数を比較することでもわかるが大変そう)(C.12) と $AA^{-1} = E, |I| = |E| = 1$ を用いて、求まる。

3 番目の式は、PRML の (C.14) にある。一般に

$$\begin{pmatrix} I_M & A \\ B^T & I_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_M & 0 \\ B^T & I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_M & A \\ 0 & I_N - B^T A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_M & A \\ 0 & I_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_M - AB^T & 0 \\ B^T & I_N \end{pmatrix} \quad (10)$$

^{*1} 解答はネットで確認できる。

線形代数の教科書にあるように、要素を比較することで、以下ようになる。

$$\begin{vmatrix} A & 0 \\ B & C \end{vmatrix} = |A||C| \quad (11)$$

そのため、上の式の 2 番目の等式の両辺の行列式をとって、

$$|I_N - B^T A| = |I_M - AB^T| \quad (12)$$

一般の線形代数の教科書にあるように偶数回の置換では行列式は変わらないから $|A| = |A^T|$ 。よって、右辺の行列を転置して、

$$|I_N - B^T A| = |I_M - BA^T| \quad (13)$$

つまり、(9) が成立している。

(3) の 3 項目を考える。本の (A.1) の式を利用すると、

$$\begin{aligned} (\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T)^{-1} &= \sigma_y^{-2} I_N - \Phi \sigma_y^{-2} (\sigma_y^{-2} \Phi^T \Phi + \sigma_w^{-2} I_{H_1})^{-1} \sigma_y^{-2} \Phi^T = \sigma_y^{-2} I_N - \Phi \sigma_y^{-2} \hat{\Sigma} \sigma_y^{-2} \Phi^T \\ &= \sigma_y^{-2} I_N - \Phi \sigma_y^{-2} \hat{\Sigma} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\Sigma} \sigma_y^{-2} \Phi^T = \sigma_y^{-2} I_N - \Phi \sigma_y^{-2} \hat{\Sigma}^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\Sigma} \sigma_y^{-2} \Phi^T \end{aligned} \quad (14)$$

最後の等式は、 $\hat{\Sigma}^{-1}$ が対称行列であること、線形代数の教科書にあるように、(E が対称行列なので) $\hat{\Sigma}$ も対称行列になることに注意した。

よって、

$$-\frac{1}{2} Y^T (\sigma_y^2 I_N + \sigma_w^2 \Phi \Phi^T)^{-1} Y = -\frac{1}{2} (\sigma_y^{-2} Y^T Y - Y^T \Phi \sigma_y^{-2} \hat{\Sigma}^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\Sigma} \sigma_y^{-2} \Phi^T Y) = -\frac{1}{2} (\sigma_y^{-2} \sum y_n^2 - \hat{\mu}^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu}) \quad (15)$$

これらをまとめると、

$$\ln p(Y|X) = -\frac{1}{2} (N \ln(2\pi) + (N \ln \sigma_y^2 + H_1 \ln \sigma_w^2 - \ln |\hat{\Sigma}|) + (\sigma_y^{-2} \sum y_n^2 - \hat{\mu}^T \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu})) \quad (16)$$

これにより、(3.78) が導出された。