

(7.18) を考える。

そもそも、ガウス過程の仮定 (と、その平均が 0 という仮定 (P.189 の脚注)) より、 $X, Y \in \mathcal{R}^N$ として、

$$p(Y|X) = \mathcal{N}(Y|0, K_\theta) = \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^N |K_\theta|}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} Y^T K_\theta^{-1} Y \right\} \quad (1)$$

なお、 K_θ は $k_\theta(x, x')$ を要素とする行列になっている。よって、(7.17) のように、

$$\ln p(Y|X) = -\frac{1}{2} Y^T K_\theta^{-1} Y - \frac{1}{2} \ln |K_\theta| - \frac{N}{2} \ln 2\pi \quad (2)$$

これを微分するが、PRML の (C.21), (C.22) (同様の話は、参考文献 [100] (<https://www2.imm.dtu.dk/pubdb/edoc/imm3274.pdf>) にある、(59) と、(46) を計算して、(C.22) 相当を求めるところにある。) を参考に、それぞれ、 θ_i で微分する。

K_θ が対称行列で、その逆行列も対称行列になるので、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \theta_i} \ln p(Y|X, \theta) &= \frac{1}{2} Y^T K_\theta^{-1} \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i} K_\theta^{-1} Y - \frac{1}{2} \text{Tr}(K_\theta^{-1} \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) = \frac{1}{2} \alpha^T \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i} \alpha - \frac{1}{2} \text{Tr}(K_\theta^{-1} \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha^T \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i} \alpha) - \frac{1}{2} \text{Tr}(K_\theta^{-1} \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) = \frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha \alpha^T \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) - \frac{1}{2} \text{Tr}(K_\theta^{-1} \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) \\ &= \frac{1}{2} \text{Tr}(\alpha \alpha^T \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i} - K_\theta^{-1} \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) = \frac{1}{2} \text{Tr}((\alpha \alpha^T - K_\theta^{-1}) \frac{\partial K_\theta}{\partial \theta_i}) \end{aligned} \quad (3)$$

3 個目の等号はスカラの Tr をとっても変わらないことを、4 個目の等号は PRML の (C.8) を使った。