

3.3.2.2 の計算を確認する。

予測分布は以下の式で求まる。

$$p(y_*|x_*, Y, X) = \int p(y_*, w|x_*, Y, X)dw = \int p(y_*|x_*, w)p(w|Y, X)dw \quad (1)$$

なお、観測は独立であるので、 $p(y_*|x_*, w) = p(y_*|x_*, w, Y, X)$, $p(w|Y, X) = p(w|x_*, Y, X)$ である。

本では、積分を行い、(3.74) を求めることになっているが、面倒なので、(A.24) を利用することで (3.76), (3.77) を求める。(3.74) を求めるには (A.24) の導出を参考にすれば良い。

(A.14), (A.15) が (3.71), (3.67) に相当する。

(A.14) と (3.71) で $x = w$, $\mu = \hat{\mu}$, $\Sigma_x = \hat{\Sigma}$, (A.15), (3.67) で $y = y_*$, $W = \phi(x_*)^T$, $b = 0$, $\Sigma_y = \sigma_y^2$ と対応する。

そうすると、(A.24) を見ると、

$$\mu_*(x_*) = \phi(x_*)^T \hat{\mu} = \hat{\mu}^T \phi(x_*) \quad (2)$$

(y_* がスカラなので、 $\mu_*(x_*)$ もスカラ。そのため、転置しても等しい。)

$$\sigma_*^2(x_*) = \sigma_y^2 + \phi(x_*)^T \hat{\Sigma} \phi(x_*) \quad (3)$$

よって、(3.76), (3.77) が求まった。

(3.75) を具体的に書き下すことで、(3.74) が正しいことを確認する。

$$\begin{aligned} \ln p(y_*|x_*, X, Y) &= -\frac{1}{2} \sigma_*^{-2}(x_*) (y_* - \mu_*(x_*))^2 + c = -\frac{1}{2} \sigma_*^{-2}(x_*) (y_*^2 - 2\mu_*(x_*)y_*) + c \\ &= -\frac{1}{2} ((\sigma_y^2 + \phi(x_*)^T \hat{\Sigma} \phi(x_*))^{-1} y_*^2 - 2(\sigma_y^2 + \phi(x_*)^T \hat{\Sigma} \phi(x_*))^{-1} \phi(x_*)^T \hat{\mu} y_*) + c \end{aligned} \quad (4)$$

最右辺の第1項に対して、(A.1) を、第2項に対して、(A.2) を変形したものを適用する。

(A.1) で $A = \sigma_y^2$, $U = \phi(x_*)^T$, $B = \hat{\Sigma}$, $V = \phi(x_*)$ とする。(A.2) で $P = \sigma_y^{-2}$, $B = \phi(x_*)$, $R = \hat{\Sigma}^{-1}$ とし、左辺の一番右の R^{-1} を右辺に移して、左辺を利用する。

すると、

$$\begin{aligned} \ln p(y_*|x_*, X, Y) &= -\frac{1}{2} ((\sigma_y^{-2} - \sigma_y^{-2} \phi(x_*)^T (\hat{\Sigma}^{-1} + \phi(x_*) \sigma_y^{-2} \phi(x_*)^T)^{-1} \phi(x_*) \sigma_y^{-2}) y_*^2 \\ &\quad - 2(\sigma_y^{-2} \phi(x_*)^T (\phi(x_*)^T \sigma_y^{-2} \phi(x_*) + \hat{\Sigma}^{-1})^{-1} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu} y_*) + c \\ &= -\frac{1}{2} ((\sigma_y^{-2} - \sigma_y^{-4} \phi(x_*)^T (\sigma_y^{-2} \phi(x_*) \phi(x_*)^T + \hat{\Sigma}^{-1})^{-1} \phi(x_*)) y_*^2 \\ &\quad - 2(\phi(x_*)^T \sigma_y^{-2} (\sigma_y^{-2} \phi(x_*)^T \phi(x_*) + \hat{\Sigma}^{-1})^{-1} \hat{\Sigma}^{-1} \hat{\mu} y_*) + c \end{aligned} \quad (5)$$

(スカラは順番を入れ替えても良い。)

よって、(3.74) が成立していることがわかる。