

(7.123) 及びその周辺を確認する。

(7.118) までは、別資料で確認した。

$$\mathcal{L}[q] = \int q(U) \left\{ \int q(X) p(F|U, X) \ln p(Y|F) dF dX + \ln \frac{p(U)}{q(U)} \right\} dU - D_{KL}[q(X)||p(X)] \quad (1)$$

これの中括弧の中の 1 項目に関して、検討する。

$$\begin{aligned} \int q(X) p(F|U, X) \ln p(Y|F) dF dX &= \int q(X) \int \dots \int \left\{ \prod_d p(F_d|U, X) \right\} \ln \left\{ \prod_d p(Y_d|F) \right\} dF_1 \dots dF_D dX \\ &= \int q(X) \int \dots \int \left\{ \prod_d p(F_{:,d}|U_{:,d}, X) \right\} \ln \left\{ \prod_d p(Y_{:,d}|F_{:,d}) \right\} dF_{:,1} \dots dF_{:,D} dX \\ &= \int q(X) \int \dots \int \left\{ \prod_d p(F_{:,d}|U_{:,d}, X) \right\} \sum_d \{ \ln p(Y_{:,d}|F_{:,d}) \} dF_{:,1} \dots dF_{:,D} dX \\ &= \int q(X) \sum_d \left\{ \int p(F_{:,d}|U_{:,d}, X) \ln p(Y_{:,d}|F_{:,d}) dF_{:,d} \right\} dX = \sum_d \int q(X) \int p(F_{:,d}|U_{:,d}, X) \ln p(Y_{:,d}|F_{:,d}) dF_{:,d} dX \\ &= \sum_d \int q(X) \ln G_d(U_{:,d}, Y_{:,d}, X) dX \end{aligned} \quad (2)$$

2 個目の等号は (7.112), (7.116) にあるようなモデルを仮定する。ここで、 $\ln G_d(U_{:,d}, Y_{:,d}, X) = \int p(F_{:,d}|U_{:,d}, X) \ln p(Y_{:,d}|F_{:,d}) dF_{:,d}$

付録 A.2 の (A.26) と比較して、 F_Z と $U_{:,d}$ 、 Y と $Y_{:,d}$ 、 F_X と $F_{:,d}$ が対応し、(A.26) では X は省略されていることを考慮すると、それぞれがガウス過程になっていることも一致するので、計算結果は一致し、(A.30) が成り立つ。 $\mu_d = K_{XZ} K_{ZZ}^{-1} U_{:,d}$ 、 $Q = K_{XZ} K_{ZZ}^{-1} K_{ZX}$ として、 $\sigma^2 I$ と $\beta^{-1} I$ が対応しているので、

$$\begin{aligned} \int q(X) p(F|U, X) \ln p(Y|F) dF dX &= \sum_d \int q(X) \ln G_d(U_{:,d}, Y_{:,d}, X) dX \\ &= \sum_d \int q(X) (\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1} I) - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[K_{XX} - Q]) dX \\ &= \sum_d (\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1} I)] - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)}[Q]]) \end{aligned} \quad (3)$$

(7.119) が求まった。

これを (7.118) に代入する。 μ_d が $U_{:,d}$ の関数であることに注意すると (Tr の部分は $U_{:,d}$ に依存しない。)

$$\begin{aligned} \mathcal{L}[q] &= \int q(U) \left\{ \int q(X) p(F|U, X) \ln p(Y|F) dF dX + \ln \frac{p(U)}{q(U)} \right\} dU - D_{KL}[q(X)||p(X)] \\ &= \int q(U) \left\{ \sum_d (\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1} I)] - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)}[Q]]) + \ln \frac{p(U)}{q(U)} \right\} dU - D_{KL}[q(X)||p(X)] \\ &= \int \dots \int \left\{ \prod_d q(U_{:,d}) \right\} \left\{ \sum_d (\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1} I)] - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)}[Q]]) \right. \\ &\quad \left. + \sum_d \ln \frac{p(U_{:,d})}{q(U_{:,d})} \right\} dU_{:,1} \dots dU_{:,D} - D_{KL}[q(X)||p(X)] \\ &= \sum_d \left[\int q(U_{:,d}) (\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1} I)] - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)}[Q]]) + \ln \frac{p(U_{:,d})}{q(U_{:,d})} \right] dU_{:,d} - D_{KL}[q(X)||p(X)] \end{aligned} \quad (4)$$

となり、(7.120) が求まる。

これを更に計算すると

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}[q] &= \sum_d \left[\int q(U_{:,d}) (\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d} | \mu_d, \beta^{-1} I)] - \frac{\beta}{2} \text{Tr} [\mathbb{E}_{q(X)} [K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)} [Q]] + \ln \frac{p(U_{:,d})}{q(U_{:,d})}) dU_{:,d} - D_{KL}[q(X) || p(X)] \right] \\
&= \sum_d \left[\int q(U_{:,d}) \ln \frac{\exp(\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d} | \mu_d, \beta^{-1} I)] p(U_{:,d}))}{q(U_{:,d})} dU_{:,d} - \frac{\beta}{2} \text{Tr} [\mathbb{E}_{q(X)} [K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)} [Q]] - D_{KL}[q(X) || p(X)] \right] \\
&= \sum_d \left\{ -D_{KL}[q(U_{:,d}) || \frac{1}{Z_d} \exp(\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d} | \mu_d, \beta^{-1} I)] p(U_{:,d})) + \ln Z_d - \frac{\beta}{2} \text{Tr} [\mathbb{E}_{q(X)} [K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)} [Q]] \right\} \\
&\hspace{25em} - D_{KL}[q(X) || p(X)] \\
&\hspace{25em} (5)
\end{aligned}$$

$\mathcal{L}[q]$ を最大にするには (A.31), (A.32) のように、 $D_{KL}[q(U_{:,d}) || \frac{1}{Z_d} \exp(\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d} | \mu_d, \beta^{-1} I)] p(U_{:,d}))]$ を 0 とするので、(7.121) のように、

$$q_{opt.}(U_{:,d}) = \frac{1}{Z_d} \exp(\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d} | \mu_d, \beta^{-1} I)] p(U_{:,d})) \quad (6)$$

Z_d は積分定数なので、

$$Z_d = \int \exp(\mathbb{E}_{q(X)} [\ln \mathcal{N}(Y_{:,d} | \mu_d, \beta^{-1} I)] p(U_{:,d})) dU_{:,d} \quad (7)$$

これは更に計算できる。

$$\begin{aligned}
Z_d &= \int \exp(\mathbb{E}_{q(X)}[\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1}I)]p(U_{:,d})dU_{:,d} = \int \exp(\mathbb{E}_{q(X)}[\ln \mathcal{N}(Y_{:,d}|\mu_d, \beta^{-1}I)]\mathcal{N}(U_{:,d}|0, K_{ZZ})dU_{:,d} \\
&= \int \left[\frac{\beta^{N/2}}{(2\pi)^{N/2}} \exp(\mathbb{E}_{q(X)}[-\frac{\beta}{2}(Y_{:,d} - K_{XZ}K_{ZZ}^{-1}U_{:,d})^T(Y_{:,d} - K_{XZ}K_{ZZ}^{-1}U_{:,d})]) \right] \\
&\quad \left[\frac{1}{(2\pi)^{M/2}|K_{ZZ}|^{1/2}} \exp(U_{:,d}^T K_{ZZ}^{-1}U_{:,d}) \right] dU_{:,d} \\
&= \frac{\beta^{N/2}}{(2\pi)^{(N+M)/2}|K_{ZZ}|^{1/2}} \int \exp(-\frac{1}{2}[U_{:,d}^T(K_{ZZ}^{-1} + \beta K_{ZZ}^{-1}\mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}]K_{ZZ}^{-1})U_{:,d} \\
&\quad - 2\beta Y_{:,d}^T \mathbb{E}_{q(X)}[K_{XZ}]K_{ZZ}^{-1}U_{:,d} + \beta Y_{:,d}^T Y_{:,d}])dU_{:,d} \\
&= \frac{\beta^{N/2}}{(2\pi)^{(N+M)/2}|K_{ZZ}|^{1/2}} \int \exp(-\frac{1}{2}[U_{:,d}^T K_{ZZ}^{-1}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])K_{ZZ}^{-1}U_{:,d} \\
&\quad - 2\beta Y_{:,d}^T \mathbb{E}_{q(X)}[K_{XZ}]K_{ZZ}^{-1}U_{:,d} + \beta Y_{:,d}^T Y_{:,d}])dU_{:,d} \\
&= \frac{\beta^{N/2}}{(2\pi)^{(N+M)/2}|K_{ZZ}|^{1/2}} \int \exp(-\frac{1}{2}[(U_{:,d} - \beta K_{ZZ}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}]Y_{:,d})^T \\
&\quad K_{ZZ}^{-1}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])K_{ZZ}^{-1}(U_{:,d} - \beta K_{ZZ}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}]Y_{:,d}) \\
&\quad - \beta^2 Y_{:,d}^T \mathbb{E}[K_{XZ}](K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}[K_{XZ}]Y_{:,d} + \beta Y_{:,d}^T Y_{:,d}])dU_{:,d} \\
&= \frac{\beta^{N/2}}{(2\pi)^{(N+M)/2}|K_{ZZ}|^{1/2}} \int [(2\pi)^{M/2}|K_{ZZ}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}K_{ZZ}|^{1/2} \\
&\quad \mathcal{N}(U_{:,d}|\beta K_{ZZ}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}]Y, K_{ZZ}(K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}K_{ZZ})] \\
&\quad \exp(-\frac{1}{2}Y_{:,d}^T[\beta I - \beta^2 \mathbb{E}[K_{XZ}](K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}[K_{XZ}]]Y_{:,d})dU_{:,d} \\
&= \frac{\beta^{N/2}|K_{ZZ}|^{1/2}}{(2\pi)^{N/2}|K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}]|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}Y^T(\beta I - \beta^2 \mathbb{E}[K_{XZ}](K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}[K_{XZ}])Y) \\
&\quad = \frac{\beta^{N/2}|K_{ZZ}|^{1/2}}{(2\pi)^{N/2}|K_{ZZ} + \beta \Psi_2|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}Y^T W Y) \tag{8}
\end{aligned}$$

最後の等号は $W = \beta I - \beta^2 \mathbb{E}[K_{XZ}](K_{ZZ} + \beta \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}])^{-1}\mathbb{E}[K_{XZ}] = \beta I - \beta^2 \Psi_1(K_{ZZ} + \beta \Psi_2)^{-1}\Psi_1^T$, $\Psi_1 = \mathbb{E}_{q(X)}[K_{XZ}]$, $\Psi_2 = \mathbb{E}_{q(X)}[K_{ZX}K_{XZ}]$ とする。

$\Psi_0 = \text{Tr}(\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}])$ とすると、(5) を最小化する場合を考える。 $q(U_{:,d})$ に関して、KL ダイバージェンスを 0 になるようにする。

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}[q] &= \sum_d \{ \ln Z_d - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}] - \mathbb{E}_{q(X)}[Q]] \} - D_{KL}[q(X)||p(X)] \\
&= \sum_d \{ \ln \left(\frac{\beta^{N/2}|K_{ZZ}|^{1/2}}{(2\pi)^{N/2}|K_{ZZ} + \beta \Psi_2|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}Y^T W Y) \right) - \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XX}]] \\
&\quad + \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[K_{XZ}(K_{ZZ})^{-1}K_{ZX}]] \} - D_{KL}[q(X)||p(X)] \\
&= \sum_d \{ \ln \left(\frac{\beta^{N/2}|K_{ZZ}|^{1/2}}{(2\pi)^{N/2}|K_{ZZ} + \beta \Psi_2|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}Y^T W Y) \right) - \frac{\beta \Psi_0}{2} + \frac{\beta}{2} \text{Tr}[\mathbb{E}_{q(X)}[(K_{ZZ})^{-1}K_{ZX}K_{XZ}]] \} - D_{KL}[q(X)||p(X)] \\
&= \sum_d \{ \ln \left(\frac{\beta^{N/2}|K_{ZZ}|^{1/2}}{(2\pi)^{N/2}|K_{ZZ} + \beta \Psi_2|^{1/2}} \exp(-\frac{1}{2}Y^T W Y) \right) - \frac{\beta \Psi_0}{2} + \frac{\beta}{2} \text{Tr}[(K_{ZZ})^{-1}\Psi_2] \} - D_{KL}[q(X)||p(X)] \tag{9}
\end{aligned}$$

(7.123) が成立する。(7.125)-(7.127) が成立することは定義より明らか。

(7.128) に関して確認する。

$$\begin{aligned}
\Psi_0 &= \sum_{n=1}^N \int k(x_n, x_n) q(x_n | \mu_n, \text{diagm}(v_n)) dx_n = \sum_{n=1}^N \int \cdots \int \sigma_f^2 \left(\prod_{i=1}^{H_0} \mathcal{N}(x_{n,i} | \mu_{n,i}, v_{n,i}) \right) dx_{n,1} \cdots dx_{H_0} \\
&= \sum_{n=1}^N \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \left(\int \mathcal{N}(x_{n,i} | \mu_{n,i}, v_{n,i}) dx_{n,i} \right) = \sum_{n=1}^N \sigma_f^2 = N \sigma_f^2
\end{aligned} \tag{10}$$

(7.129) に関して確認する。

$$\begin{aligned}
[\Psi_1]_{n,m} &= \int k(x_n, z_m) q(x_n) dx_n = \int \cdots \int \sigma_f^2 \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{H_0} w_i (x_{n,i} - z_{m,i})^2\right) \left(\prod_{i=1}^{H_0} \mathcal{N}(x_{n,i} | \mu_{n,i}, v_{n,i}) \right) dx_{n,1} \cdots dx_{H_0} \\
&= \sigma_f^2 \int \cdots \int \left(\prod_{i=1}^{H_0} \mathcal{N}(x_{n,i} | \mu_{n,i}, v_{n,i}) \exp\left(-\frac{1}{2} w_i (x_{n,i} - z_{m,i})^2\right) \right) dx_{n,1} \cdots dx_{H_0} \\
&= \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \left(\int \frac{1}{\sqrt{2\pi v_i}} \exp\left(-\frac{(x_{n,i} - \mu_{n,i})^2}{2v_i}\right) \exp\left(-\frac{1}{2} w_i (x_{n,i} - z_{m,i})^2\right) dx_{n,i} \right) \\
&= \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \left(\int \frac{1}{\sqrt{2\pi v_i}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{(x_{n,i} - \mu_{n,i})^2}{v_i} + w_i (x_{n,i} - z_{m,i})^2 \right) \right) dx_{n,i} \right) \\
&= \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \left(\int \frac{1}{\sqrt{2\pi v_i}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\left(w_i + \frac{1}{v_i}\right) (x_{n,i} - \frac{w_i v_i z_{m,i} + \mu_{n,i}}{w_i v_i + 1})^2 + \frac{w_i (\mu_{n,i} - z_{m,i})^2}{w_i v_i + 1} \right) \right) dx_{n,i} \right) \\
&= \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \exp\left(-\frac{w_i (\mu_{n,i} - z_{m,i})^2}{2(w_i v_i + 1)}\right) \left(\frac{1}{\sqrt{v_i (w_i + \frac{1}{v_i})}} \int \frac{\sqrt{w_i + \frac{1}{v_i}}}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\left(w_i + \frac{1}{v_i}\right) (x_{n,i} - \frac{w_i v_i z_{m,i} + \mu_{n,i}}{w_i v_i + 1})^2 \right) \right) dx_{n,i} \right) \\
&= \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \frac{1}{\sqrt{w_i v_i + 1}} \exp\left(-\frac{w_i (\mu_{n,i} - z_{m,i})^2}{2(w_i v_i + 1)}\right) \left(\int \mathcal{N}(x_{n,i} | \frac{w_i v_i z_{m,i} + \mu_{n,i}}{w_i v_i + 1}, (w_i + \frac{1}{v_i})^{-1}) dx_{n,i} \right) \\
&= \sigma_f^2 \prod_{i=1}^{H_0} \frac{1}{\sqrt{w_i v_i + 1}} \exp\left(-\frac{w_i (\mu_{n,i} - z_{m,i})^2}{2(w_i v_i + 1)}\right)
\end{aligned} \tag{11}$$

(7.130) に関して確認する。

$$[\Psi_2]_{m,m'} = \sum_{n=1}^N \int k(x_n, z_m) k(x_n, z_{m'}) q(x_n) dx_n \equiv \sum_{n=1}^N [\Psi_2^n]_{m,m'} \tag{12}$$

つまり、 $[\Psi_2^n]_{m,m'} = \int k(x_n, z_m) k(x_n, z_{m'}) q(x_n) dx_n$ 。

ToDo