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。

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

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、ベイズの定理を用いて、(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) を直接求めるには (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、

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

(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。)

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

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。

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

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 $P={\sigma_y}^{-2},B=\phi(x_*),R=\hat{\Sigma}^{-1}$ として、両辺の右側から R をかけて、左辺を利用する。

すると、

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

(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。