12.17

(問題文の「…と同様な表現に導くことを示せ」の意味がわからない。が、たぶんμについて最小化したJを示せということだと思う。)

(μについてJを最小化する)

$$J = \sum_{n=1}^{N} \| x_n - \mu - W z_n \|^2 \cdots (12.95)$$

より

$$J = \sum_{n=1}^{N} (x_n - \mu - W z_n)^T (x_n - \mu - W z_n)$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \left(x_n^T x_n - x_n^T \mu - x_n^T W z_n - \mu^T x_n + \mu^T \mu + \mu^T W z_n - z_n^T W^T x_n + z_n^T W^T \mu + z_n^T W^T W z_n \right)$$

これより

$$0 = \frac{\partial J}{\partial \mu} = \sum_{n=1}^{N} \left\{ -x_n - x_n + 2\mu + (W z_n) + z_n W \right\}$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \left\{ -2x_n + 2\mu + 2 z_n W \right\}$$

・(C.19) $\frac{\partial x^T a}{\partial x} = \frac{\partial a^T x}{\partial x} = a$

・ベクトル微分のchain rule

$u = u(x)$, $v = v(x)$ のとき

$\frac{\partial u^T v}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial x} u + \frac{\partial v}{\partial x} v$ (denominator layout)

なので

$\frac{\partial x^T x}{\partial x} = 2x$ (denominator layout)

注 付録Cは

(C.18)のみnumerator layoutになってて

他の微分の式はdenominator layoutになっている。

使うときはどっちかに統一して使うこと.

よって

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^{N} (x_n - z_n W)$$

$$\therefore \mu = \bar{x} - W \bar{z}$$

を得る。これを(12.95)に入れると、μについて最小化したJの値は

$$J_{\substack{\min \\ \text{about } \mu}} = \sum_{n=1}^{N} \| x_n - (\bar{x} - W\bar{z}) + W z_n \|^2$$

$$= \sum_{n=1}^{N} \| (x_n - \bar{x}) - W (z_n - \bar{z}) \|^2$$

となる。

（J を $\mathbf{z}_n$ について最小化する）

この J を $\mathbf{z}_n$ について微分して 0 とおく

$$0 = \frac{\partial J}{\partial \mathbf{z}_n} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}_n} \sum_{n=1}^{N} \| (\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}) - \mathbf{W}(\mathbf{z}_n - \bar{\mathbf{z}}) \|^2$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}_n} \{(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}) - \mathbf{W}(\mathbf{z}_n - \bar{\mathbf{z}})\}^T \{(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}) - \mathbf{W}(\mathbf{z}_n - \bar{\mathbf{z}})\}$$

$$= \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}_n} \{(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{W}\bar{\mathbf{z}}) - \mathbf{W}\mathbf{z}_n\}^T \{(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{W}\bar{\mathbf{z}}) - \mathbf{W}\mathbf{z}_n\}$$

$$= (-1)\mathbf{W}^T 2 \{(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{W}\bar{\mathbf{z}}) - \mathbf{W}\mathbf{z}_n\}$$

・ベクトル微分のchain rule
$f = f(\mathbf{u}),\ \mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{x})$ のとき
$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}}$ （$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{u}}$ も $\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{x}}$ も denominator layout）

・$\frac{\partial \mathbf{x}^T\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = 2\mathbf{x}$

・$\frac{\partial \mathbf{A}\mathbf{x}}{\partial \mathbf{x}} = \mathbf{A}^T$

（denominator layout）

よって

$$\mathbf{W}^T\mathbf{W}\mathbf{z}_n = \mathbf{W}^T(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}} + \mathbf{W}\bar{\mathbf{z}})$$

$$\therefore\quad \mathbf{z}_n = (\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_n - \bar{\mathbf{x}}) + \bar{\mathbf{z}}$$

を得る。これより

$$\left((\mathbf{z}_1 - \bar{\mathbf{z}}) \cdots (\mathbf{z}_N - \bar{\mathbf{z}})\right) = \left((\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}}) \cdots (\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T(\mathbf{x}_N - \bar{\mathbf{x}})\right)$$

$$= (\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T\left((\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}}) \cdots (\mathbf{x}_N - \bar{\mathbf{x}})\right)$$

を得る。ここで

$$\Omega = \left((\mathbf{z}_1 - \bar{\mathbf{z}}) \cdots (\mathbf{z}_N - \bar{\mathbf{z}})\right)$$

$$\tilde{\mathbf{X}} = \begin{pmatrix} (\mathbf{x}_1 - \bar{\mathbf{x}})^T \\ \vdots \\ (\mathbf{x}_N - \bar{\mathbf{x}})^T \end{pmatrix}$$

とすると、

$$\Omega = (\mathbf{W}^T\mathbf{W})^{-1}\mathbf{W}^T\tilde{\mathbf{X}}^T$$

となる。これは (12.58) で $E[\mathbf{z}_n]$ を $\mathbf{z}_n - \bar{\mathbf{z}}$ に置き換えたものと同じになっている。

（J を W について最小化する）

$$0 = \frac{\partial J}{\partial W} = \frac{\partial}{\partial W}\sum_{n=1}^{N} \| (x_n - \bar{x}) - W(z_n - \bar{z}) \|^2$$

$$= \frac{\partial}{\partial W}\sum_{n=1}^{N} \{(x_n-\bar{x}) - W(z_n-\bar{z})\}^T \{(x_n-\bar{x}) - W(z_n-\bar{z})\}$$

行列 W の微分の chain rule を使うのを避けるため、式を展開している。

$$= \frac{\partial}{\partial W}\sum_{n=1}^{N} \{(x_n-\bar{x})^T(x_n-\bar{x}) - (x_n-\bar{x})^T W (z_n-\bar{z}) - (z_n-\bar{z})^T W^T (x_n-\bar{x}) + (z_n-\bar{z})^T W^T W (z_n-\bar{z})\}$$

$$= \sum_{n=1}^{N} -(x_n-\bar{x})(z_n-\bar{z})^T - (x_n-\bar{x})(z_n-\bar{z})^T + 2W(z_n-\bar{z})(z_n-\bar{z})^T$$

$$= \sum_{n=1}^{N} -2(x_n-\bar{x})(z_n-\bar{z})^T + 2W(z_n-\bar{z})(z_n-\bar{z})^T$$

$$\frac{\partial}{\partial W} a^T W b = \frac{\partial}{\partial W} \mathrm{Tr}(a^T W b)$$

スカラなので $\mathrm{Tr}(\cdot)$ しても同じ

$$= \frac{\partial}{\partial W} \mathrm{Tr}(W b a^T)$$

Tr の回転

$$= (b a^T)^T = a b^T$$

(C.24) denominator layout

$$\frac{\partial}{\partial W} b^T W^T a = \frac{\partial}{\partial W} a^T W b = a b^T$$

スカラなので転置しても同じ

$$\frac{\partial}{\partial W} b^T W^T W b = \frac{\partial}{\partial W} \mathrm{Tr}(b^T W^T W b)$$

スカラなので Tr しても同じ

$$= \frac{\partial}{\partial W} \mathrm{Tr}(b b^T W^T W)$$

Tr の回転

$$= W((b b^T)^T + b b^T)$$

$$= 2 W b b^T$$

演習12.15の解答参照

$$\frac{\partial}{\partial X} \mathrm{Tr}(A X^T X) = X(A^T + A)$$

(denominator layout)

これより

$$\sum_{n=1}^{N} W(z_n-\bar{z})(z_n-\bar{z})^T = \sum_{n=1}^{N} (x_n-\bar{x})(z_n-\bar{z})^T$$

$$\therefore W \sum_{n=1}^{N} (z_n-\bar{z})(z_n-\bar{z})^T = \sum_{n=1}^{N} (x_n-\bar{x})(z_n-\bar{z})^T$$

$$\therefore W = \left\{\sum_{n=1}^{N} (x_n-\bar{x})(z_n-\bar{z})^T\right\}\left\{\sum_{n=1}^{N} (z_n-\bar{z})(z_n-\bar{z})^T\right\}^{-1}$$

を得る。

これより

$$W = \left\{ \left((x_1-\bar{x}) \cdots (x_N-\bar{x})\right) \begin{pmatrix} (z_1-\bar{z})^T \\ \vdots \\ (z_N-\bar{z})^T \end{pmatrix} \right\} \left\{ \left((z_1-\bar{z}) \cdots (z_N-\bar{z})\right) \begin{pmatrix} (z_1-\bar{z})^T \\ \vdots \\ (z_N-\bar{z})^T \end{pmatrix} \right\}^{-1}$$

なので上記 Ω, $\tilde{X}$ を使うと

$$W = \tilde{X}^T \Omega^T (\Omega \Omega^T)^{-1}$$

となる。これは、(12.59) で $E[z_n]$ を $z_n - \bar{z}$ に置き換えたものと同じになっている。